

PHASEの新機能紹介

山本武範

アドバンスソフト株式会社 主事研究員



- PHASEの紹介
- 強相関係の電子状態計算機能
 - DFT+U法
 - 計算例: SrTiO₃, FeO
- ワニア関数計算機能
 - Maximally localized Wannier function
 - 計算例: H₂O, C₂H_m, Si, GaAs
- 点計算向け高速化による大規模計算
 - 計算例: Si₇₉₉₉As, DNA

PHASEの紹介

擬ポテンシャルデータベース

擬ポテンシャル作成ソフト

- CIAO**
- TM型ノルム保存PP
 - ウルトラソフトPP

GUI
CHASE-3PT

PHASE
第一原理
分子動力学ソフト

CAMUS

ハイブリッド計算ソフト
QM/TB/MM

使用頻度の高い多くの
元素について検証済み

UVSOR

誘電応答解析ソフト

誘電関数
非線形感受率
有効質量

PHASEの計算手法

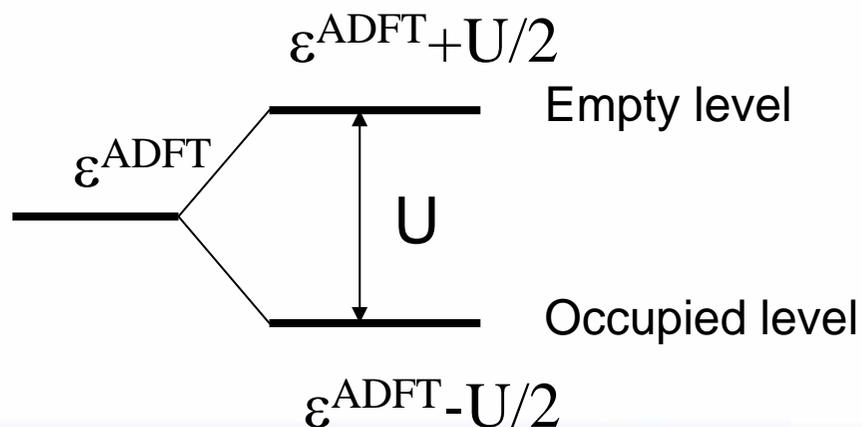
- 密度汎関数理論
- 擬ポテンシャル
 - TM型ノルム保存擬ポテンシャル
 - Vanderbilt型ウルトラソフト擬ポテンシャル
- 平面波基底
- 電子状態解法
 - Modified steepest decent (MSD)法
 - 直線探索付きMSD法
 - 残差最小化法
 - Davidson法

DFT+U法

局在軌道間のクーロン相互作用を補正する。

全エネルギー
$$E_{ADFT+U} = E_{ADFT} + \frac{U}{2} \sum_I \sum_{m,\sigma} \left\{ \rho_{m,m}^{I\sigma} - \sum_{m'} \rho_{m,m'}^{I\sigma} \rho_{m',m}^{I\sigma} \right\}$$

占有行列
$$\rho_{mm'}^{I\sigma} = \sum_{k,n} f_{kn}^{\sigma} \langle \psi_{kn}^{\sigma} | \phi_m^I \rangle \langle \phi_{m'}^I | \psi_{kn}^{\sigma} \rangle$$



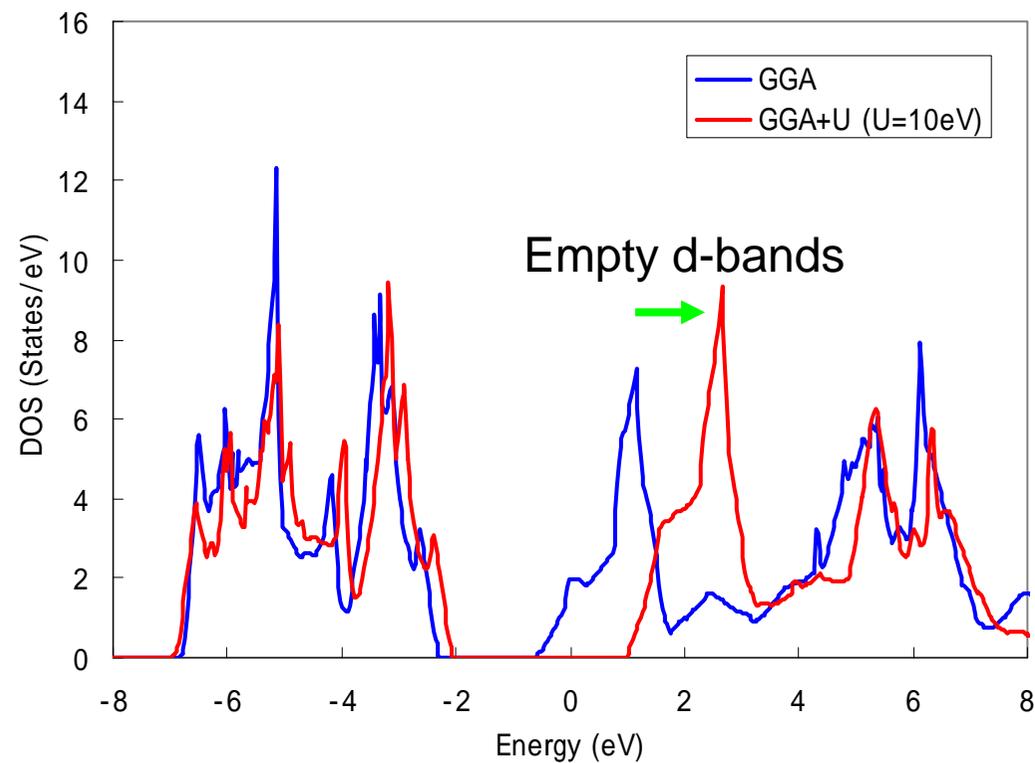
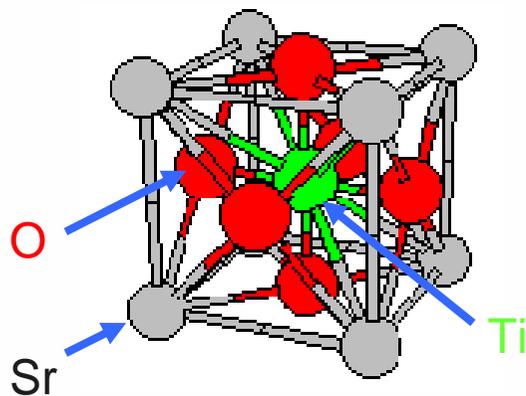
プロジェクト関数 ϕ_m^I には原子軌道やワニア関数を使用する。

強相関電子系の電子状態計算(1)

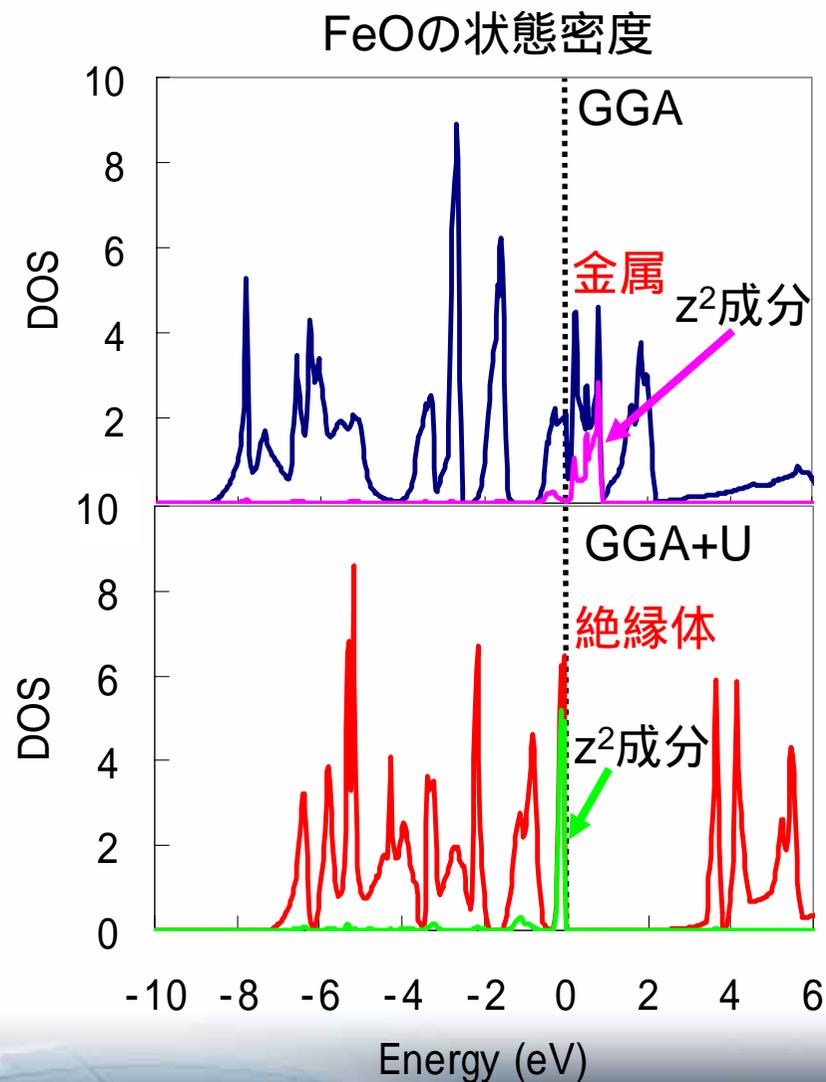
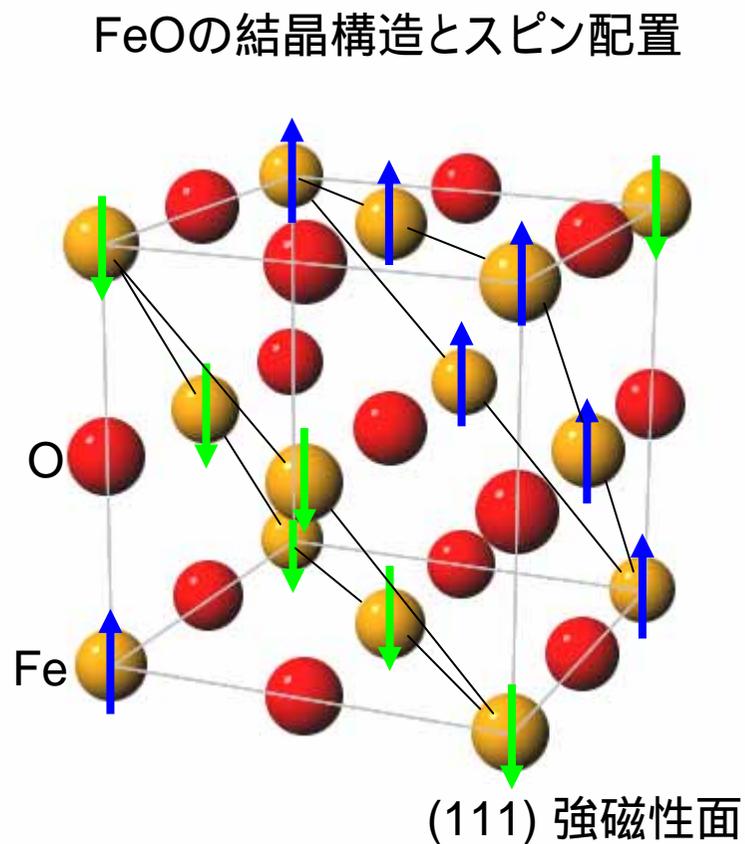
SrTiO₃の状態密度

バンドギャップ (eV)

GGA	GGA+U (U=10eV)	Exp.
1.8	3.1	3.3



強相関電子系の電子状態計算(2)



Maximally localized Wannier function

局在化汎関数

$$\Omega = \sum_n \left(\langle w_n | r^2 | w_n \rangle - \langle w_n | r | w_n \rangle^2 \right)$$



最小化 (steepest-descent minimization)

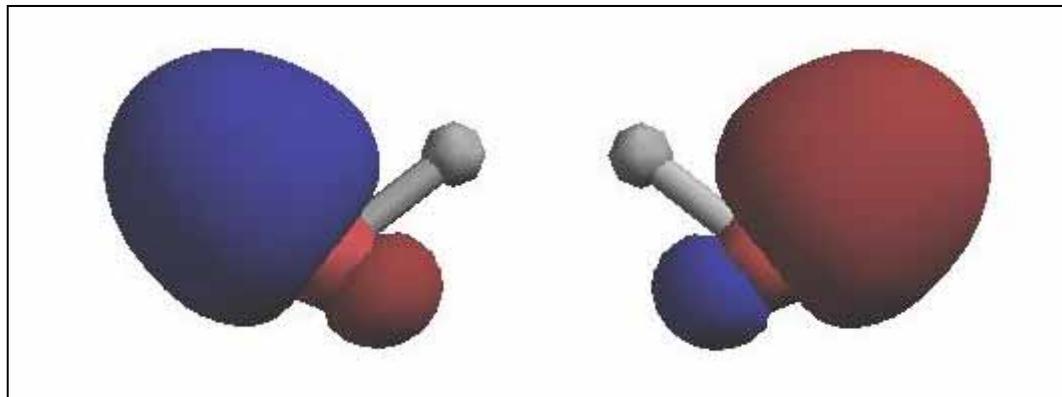
$$w_n = \sum_m U_{mn} w_m^{(0)} \quad \text{ユニタリー変換}$$

最大局在化ワニア関数 w_n^{MLWF}

水分子のMLWF

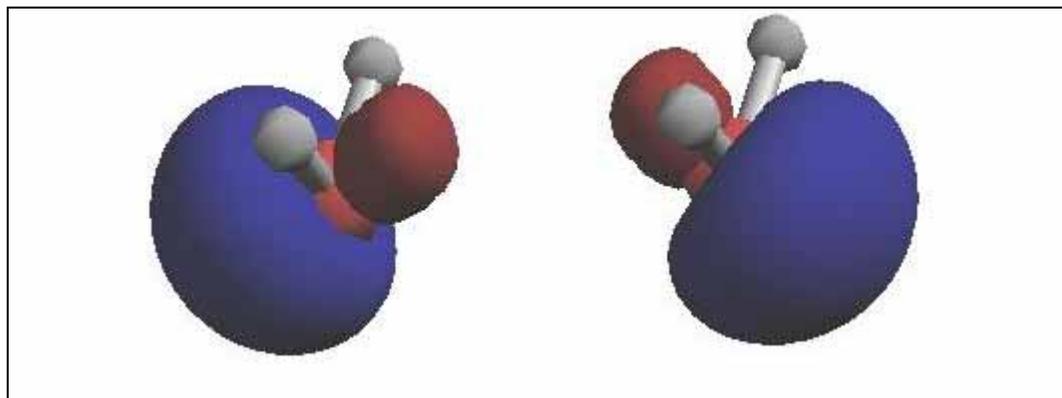
共有電子対

酸素-WCの距離
 0.53

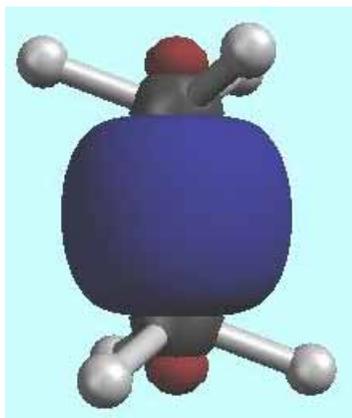
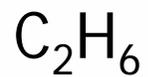


非共有電子対

酸素-WCの距離
 0.31

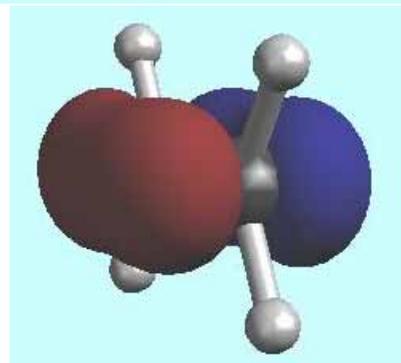
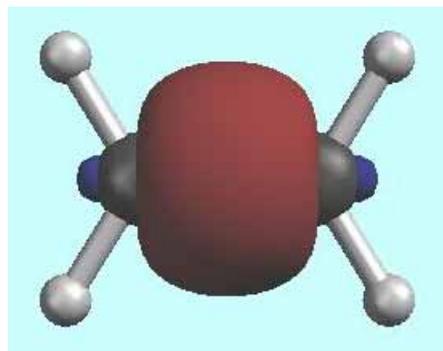
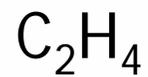
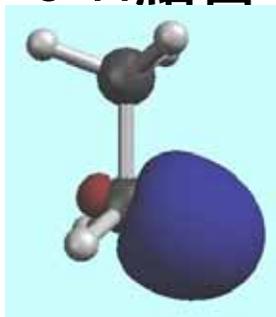


炭化水素のC-C結合

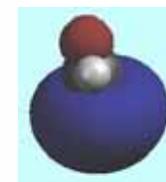
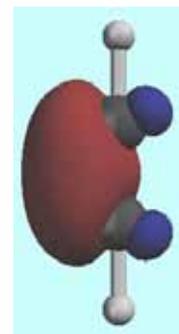
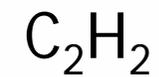


1重結合

C-H結合



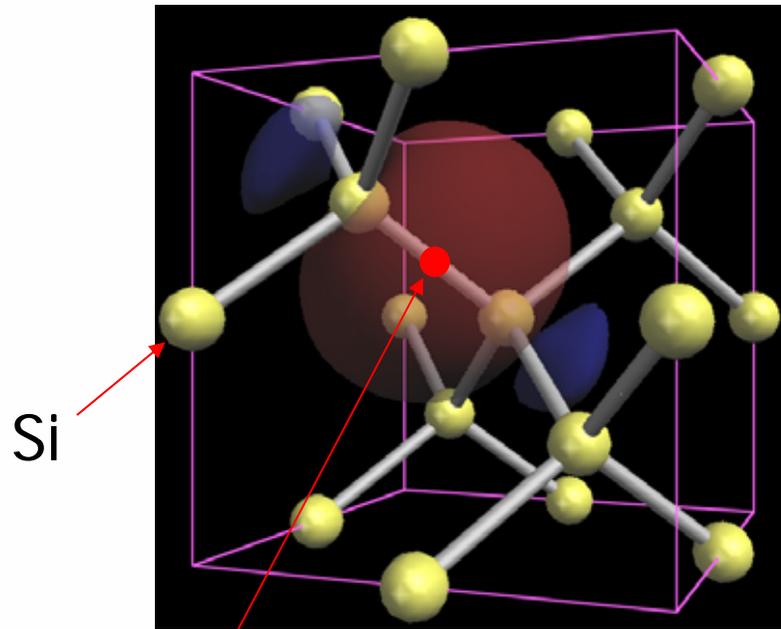
2重結合



3重結合

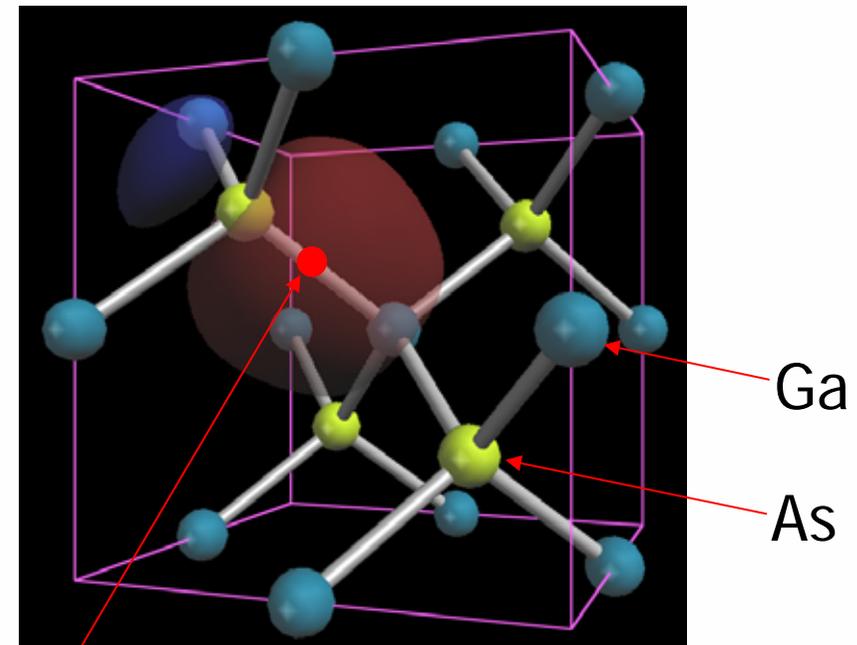
Si結晶とGaAs結晶のMLWF

Si結晶



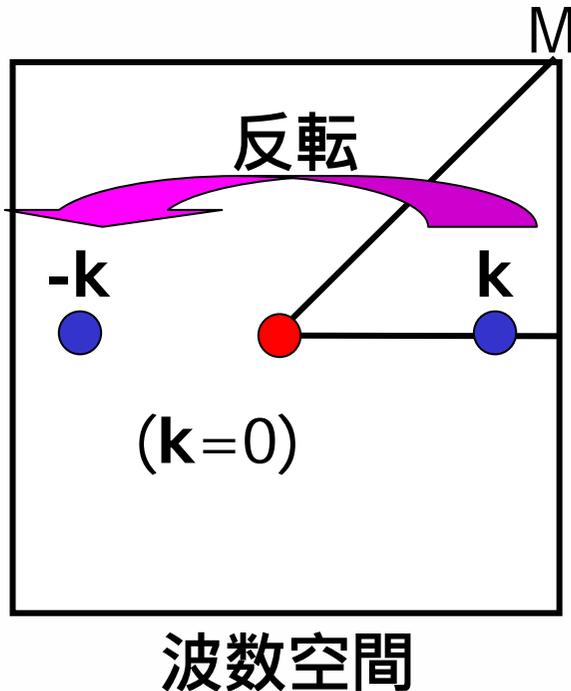
ワニア中心はSi-Si結合の中心に位置する。

GaAs結晶



ワニア中心はGa-As結合の中心からAs側に結合長の1割程度ずれている。

点計算向け高速化



ブロッホ波 $\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r})$

$u_{nk}(\mathbf{r})$ が満たすべき方程式

$$X \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - i \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{k} \cdot \nabla + V(\mathbf{r}) \right] u_{nk}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) u_{nk}(\mathbf{r})$$

$$u_{nk}^*(\mathbf{r}) = u_{n-k}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{k}=0 \text{なら } u_{nk}(\mathbf{r}) \text{ は実関数になる。}$$

- ・必要とするメモリ量の削減
- ・演算量の削減



大規模計算が容易になる。