

JAERI-Data/Code
2003-007



JP0350222



ナノマテリアルデザインコード整備
— CMDワークショップで使した計算コードの計算例 —

2003年5月

宮崎 幹也

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問い合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越し下さい。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布を行っております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 〒319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 2003

編集兼発行 日本原子力研究所

ナノマテリアルデザインコード整備

—CMD ワークショップで使った計算コードの計算例—

日本原子力研究所計算科学技術推進センター

宮崎 幹也

(2003年2月25日受理)

新物質や新デバイスなどの研究開発は、これからの社会の発展を支える中心的な役割を果たすと考えられているが、経験的・実験的なアプローチが主体となったこれまでの取り組みは、もはや限界に達している。今後は物質の構造をより微細な状態で取り扱う必要があり、これまでの古典的な理論を用いた計算手法では既に、精度上の限界が生じている。これらの問題を解決する手法として、量子力学に基礎を置く最先端の電子状態計算手法についての研究が進められている。第一原理計算による物性予測に基づいた、このマテリアルデザインの手法は、このような状況におけるブレークスルーとなる可能性が極めて高いと考えられている。

本報告書は、2002年9月17～21日にかけて原研 ITLB 棟および国際高等研で行われた、「コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン ワークショップ」(大阪大学「計算機ナノマテリアルデザイン」プロジェクト主催)において講習を実施した MACHIKANEYAMA-2000 および OSAKA-2000 を PC クラスタシステムに導入した際に行った、サンプル計算問題を用いた動作確認の結果についてまとめたものである。さらに、これらの計算コードの利用環境整備の一環として、Graphical User Interface (GUI) 環境の整備について検討を行った。

Environmental Construction of Nano-Material Design Codes

— The example of simulation codes used in the CMD workshop —

Mikiya MIYAZAKI

Center for Promotion of Computational Science and Engineering
(Kansai Site)

Japan Atomic Energy Research Institute
Kizu-cho, Souraku-gun, Kyoto

(Received February 25, 2003)

Generally it is well known that the R&D works on new materials or devices will play a central role on the evolution of future society. But, the old ways based on the empirical and experimental approach have already reached the limit, especially for dealing with a strange substance and material. The structure of a substance and material is needed to be dealt with in detail by quantum mechanics, because the limit on accuracy has come in sight in the calculation using a classical theory. The research on the latest electronic state calculation technique founded on quantum mechanics made a great advance as the technique of solving these problems as well as the technique of a computational materials design. It enables the prediction of material properties because it is based on First Principles. Therefore, in the future it is expected to have a very high possibility of becoming a breakthrough in such a situation.

In this article, the example calculation results by PC cluster on the codes (MACHIKANEYAMA-2000, OSAKA-2000) used in the CMD (Computational Materials Design) workshop, held on Sep.19-21, at ITBL-Building and International Institute for Advanced Studies under the auspices of the University of Osaka, are described. Furthermore, the graphical user interfaces on the codes are examined.

Keywords: Nano Material, Material Design, First Principle, ab Initio,
MACHIKANEYAMA-2000, AKAI-KKR, OSAKA-2000, XBAND, Gourmet

目次

1. はじめに	1
2. MACHIKANEYAMA-2000 の計算	2
2.1. プログラム導入	2
2.2. 鉄(Fe)の解析	2
2.3. ニッケル(Ni)の解析	8
2.4. 格子定数を変化させた鉄(Fe)の解析	12
3. OSAKA-2000 の計算	26
3.1. プログラム導入	26
3.2. 擬ポテンシャルの作成	27
3.3. 結晶データの作成	29
3.4. 電化分布密度計算	31
3.5. DOS 構造計算	35
3.6. バンド構造計算	37
3.7. 原子位置の最適化	40
3.8. 分子動力学計算	42
4. GUI 環境整備の検討	46
4.1. XBAND の調査	46
4.2. MACHIKANEYAMA-2000、OSAKA-2000 の現状調査	47
4.3. Gourmet を用いた環境整備の検討	48
5. おわりに	54
謝辞	55
参考文献	55

Contents

1. Introduction	1
2. The Example of Calculation by MACHIKANEYAMA-2000	2
2.1. Installation	2
2.2. Analysis of Iron	2
2.3. Analysis of Nickel	8
2.4. Analysis of Iron to which the Lattice Constant was Changed	12
3. The Example of Calculation by OSAKA-2000	26
3.1. Installation	26
3.2. Creation of Pseudo Potential	27
3.3. Creation of Crystal Data	29
3.4. Electrification Distribution Density Calculation	31
3.5. DOS Structure Calculation	35
3.6. Band Structure Calculation	37
3.7. Optimization of Atomic Position	40
3.8. Molecular Dynamics Calculation	42
4. Examination of GUI Environmental	46
4.1. Investigation of XBAND	46
4.2. Present Condition Investigation	47
4.3. Examination of Environmental Using Gourmet	48
5. Summary	54
Acknowledgement	55
Reference	55

1. はじめに

近年におけるハードウェアとソフトウェアの目覚ましい発達は、物質の基本法則である第一原理 (First-Principle または ab-initio) 計算による材料設計を極めて現実的なものにした。この計算物理学的手法である第一原理計算は、経験的パラメータを用いることなく原子番号だけを出発点として、世の中にまだ存在しない仮想物質や新物質の個性を正確に評価し、定量的な物性の予測を行える唯一の理論的枠組みであると言える。解明したい自然現象に最適な計算手法を適用し、現時点での最も信頼できる結果を大規模数値計算によって導き出すこのような計算科学の手法は、ハードウェアおよびソフトウェアの発展とも不可分である。

産業構造の変革に伴い、物質科学・材料科学の分野においてもこれまで以上の高機能性が追求され、多様化への要求が高まっている。それらと同時に地球環境に配慮した物作りの標準化など、材料開発に対する柔軟性と迅速性が求められている。優れた物性や高度の環境調和性を兼ね備えた材料開発を効率よく行うためには、試行錯誤を繰り返す従来からの経験的・実験的な材料開発の手法に取って代わり、新しい理論やシミュレーションに基づいたマテリアルデザイン手法が必要不可欠となる。現在、いくつかの企業や大学などにおいて独創的なアイデアに基づいた第一原理計算によるマテリアルデザインの研究が進行している。

本報告書は、マテリアルデザインの基本となる最先端の電子状態計算手法を体験することで、物質科学の新しいパラダイムに対応できる基礎的能力を身に付けることを目的として2002年9月17日(火)～9月21日(土)に行われた「コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン ワークショップ」(http://www.iias.or.jp/event/designworkshop/work_design.html) で使用するために、マテリアルデザインのための計算物理学的手法である計算コード MACHIKANAYAMA-2000[†]、および OSAKA-2000[‡]をPCクラスタシステムに導入した後、正常に動作することを確認するために行ったサンプル問題の計算結果について解説するものである。また、これらの計算コードの利用環境整備の一環として、GUI環境の整備についての検討を最後に行っている。

本報告書で述べている「ナノマテリアルデザインコード整備」は、第一原理計算のための計算コードを広く利用できる環境を整備することにより、マテリアルデザイン研究の一助になることを期待して、計算科学技術推進センターITBL 利用推進室において進められているものである。

[†] 大阪大学大学院理学研究科 赤井研究室にて開発

[‡] 大阪大学産業科学研究所 白井光雲氏らにより開発

2. MACHIKANEYAMA-2000 の計算

大阪大学大学院理学研究科 赤井研究室において開発が行われている、密度汎関数法に基づくグリーン関数法 (KKR-CPA-LDA) を用いたバンド計算コードである MACHIKANEYAMA-2000 (AKAI-KKR) の導入と、動作確認として実施した Fe、Ni の解析および格子定数を変化させた Fe の解析について解説を行う。

本章で行った、プログラムの導入および動作確認として実施した計算の解説には、CMD ワークショップで使用した、佐藤和則氏・小谷岳生氏による「Akai KKR-CPA-LDA によるバンド計算」(<http://sham.phys.sci.osaka-u.ac.jp/~kkr/DOC/cmdtxt1.pdf>) を参考にした。

2.1. プログラム導入

(1) プログラムの入手

大阪大学の WEB サイト (<http://sham.phys.sci.osaka-u.ac.jp/~kkr/>) においてユーザー登録を行い、プログラムパッケージ `cpa2002v***.tar.gz` (“***”はバージョン番号) のダウンロードを行う。

(2) プログラムの作成

プログラムは、ダウンロードしたパッケージに含まれている source ディレクトリ以下に置かれた 100 以上のサブルーチンからなっている。対象とする結晶や計算の規模に応じてメインルーチン `specx.f` を変更してコンパイルする必要がある。コンパイルには、`make` コマンドを使用する。ダウンロードしたパッケージに含まれている `makefile` に従って、実行ファイル `specx` が作成される。

(3) プログラムの実行

MACHIKANEYAMA-2000 では、結晶格子や格子点に置く原子の種類などを書いたインプットファイルを入力することで、バンド計算が開始される。ただし、インプットファイルの入力は標準入力から行われるため、リダイレクションによりファイルを指定する必要がある。同様に、計算結果の出力も標準出力に行われるため、ファイルにリダイレクトすると便利である。実行例を以下に示す。ここで、`in`、`out` ディレクトリは、ダウンロードしたパッケージに含まれているインプットファイル用ディレクトリおよびアウトプットファイル用ディレクトリである。

```
% specx < in/inputfile > [out/outputfile]
```

2.2. 鉄(Fe)の解析

(1) サンプル問題の物理的な条件

典型的な強磁性金属の例として Fe についての電子状態計算を行い、状態密度を表示する。状態密度を表示することで、固体の電子状態および化学結合の様子を直観的に理解する。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

プログラムでは多くの配列が用いられるが、主な配列は `specx.f` 中のパラメータを変更するこ

とで必要な大きさの配列が確保できる。

(3) 入力データ

インプットファイルを以下のように作成する。インプットファイルには、主に結晶格子に関する情報を入力する。主な入力パラメータとオプションについては、ダウンロードしたパッケージに含まれている readin.f ファイル、または前述の「Akai KKR-CPA-LDA によるバンド計算」に詳しく述べられているため、ここでは省略する。

```
# now # can be used as comment lines as well
#
go data/Fe2 bcc 5.42, 1.0, 1.0, 90.0, 90.0, 90.0,
0.001 1.0 sra vwn mag 2nd
update 10 990 0.010
1
#
# name of type, number of components, rtr,
# field, lmax, atomic number, concentration
#
Fe 1 0 0.0 2 26 100
1
0.00000000 0.00000000 0.00000000 Fe
```

先頭が“#”または“c”で始まる行は、コメント行とみなされる。入力データの区切りは、空白またはカンマである。

(4) 計算実行方法

実行方法は、前節の(3)で述べたとおりである。

(5) 計算結果

計算結果を以下に示す。

```
10-Oct-2002
meshr mse ng mxl
400 35 15 3

data read in
go=go file=data/Fe2
brvtyp=bcc a= 5.42000 c/a=1.00000 b/a=1.00000
alpha= 90.0 beta= 90.0 gamma= 90.0
edelt= 0.0010 ewidth= 1.000 reltyp=sra sdftyp=vwn magtyp=mag
record=2nd outtyp=update bzqlty=10 maxitr=990 pmix=0.01000
ntyp= 1 natm= 1 ncmpx= 1

complex energy mesh
1(-1.0000, 0.0000) 2(-0.9998, 0.0027) 3(-0.9990, 0.0062)
4(-0.9971, 0.0107) 5(-0.9933, 0.0163) 6(-0.9862, 0.0234)
7(-0.9738, 0.0319) 8(-0.9535, 0.0421) 9(-0.9220, 0.0536)
10(-0.8757, 0.0660) 11(-0.8117, 0.0782) 12(-0.7292, 0.0889)
13(-0.6307, 0.0965) 14(-0.5224, 0.0999) 15(-0.4130, 0.0985)
16(-0.3115, 0.0926) 17(-0.2245, 0.0835) 18(-0.1553, 0.0724)
19(-0.1037, 0.0610) 20(-0.0671, 0.0500) 21(-0.0424, 0.0403)
22(-0.0262, 0.0320) 23(-0.0160, 0.0251) 24(-0.0096, 0.0195)
25(-0.0057, 0.0151) 26(-0.0034, 0.0116) 27(-0.0020, 0.0089)
28(-0.0012, 0.0069) 29(-0.0007, 0.0052) 30(-0.0004, 0.0040)
31(-0.0002, 0.0031) 32(-0.0001, 0.0023) 33(-0.0001, 0.0018)
34( 0.0000, 0.0014) 35( 0.0000, 0.0010)
```


itr= 13	neu= -0.0024	moment= 1.7937	te= -2541.1058321	err= -1.035
itr= 14	neu= 0.0158	moment= 1.8941	te= -2541.1082603	err= -1.028
itr= 15	neu= 0.0259	moment= 1.9927	te= -2541.1103832	err= -1.018
itr= 16	neu= 0.0378	moment= 2.0276	te= -2541.1113662	err= -1.076
itr= 17	neu= 0.0630	moment= 2.1023	te= -2541.1124881	err= -1.065
itr= 18	neu= 0.0590	moment= 2.1589	te= -2541.1132455	err= -1.094
itr= 19	neu= 0.0458	moment= 2.2104	te= -2541.1138036	err= -1.117
itr= 20	neu= 0.0398	moment= 2.2317	te= -2541.1140817	err= -1.139
itr= 21	neu= 0.0338	moment= 2.2450	te= -2541.1142271	err= -1.163
itr= 22	neu= 0.0190	moment= 2.2610	te= -2541.1144234	err= -1.242
itr= 23	neu= -0.0037	moment= 2.2800	te= -2541.1145632	err= -1.303
itr= 24	neu= -0.0234	moment= 2.2972	te= -2541.1146709	err= -1.356
itr= 25	neu= -0.0353	moment= 2.3004	te= -2541.1147839	err= -1.450
itr= 26	neu= -0.0437	moment= 2.3049	te= -2541.1148846	err= -1.527
itr= 27	neu= -0.0451	moment= 2.3071	te= -2541.1149513	err= -1.608
itr= 28	neu= -0.0399	moment= 2.3054	te= -2541.1149910	err= -1.650
itr= 29	neu= -0.0297	moment= 2.3005	te= -2541.1150173	err= -1.610
itr= 30	neu= -0.0170	moment= 2.2945	te= -2541.1150286	err= -1.534
itr= 31	neu= -0.0054	moment= 2.2903	te= -2541.1150486	err= -1.509
itr= 32	neu= 0.0039	moment= 2.2861	te= -2541.1150689	err= -1.516
itr= 33	neu= 0.0122	moment= 2.2814	te= -2541.1150944	err= -1.557
itr= 34	neu= 0.0174	moment= 2.2783	te= -2541.1151240	err= -1.631
itr= 35	neu= 0.0200	moment= 2.2753	te= -2541.1151467	err= -1.732
itr= 36	neu= 0.0196	moment= 2.2730	te= -2541.1151597	err= -1.830
itr= 37	neu= 0.0168	moment= 2.2718	te= -2541.1151646	err= -1.937
itr= 38	neu= 0.0122	moment= 2.2717	te= -2541.1151661	err= -2.072
itr= 39	neu= 0.0068	moment= 2.2726	te= -2541.1151664	err= -2.201
itr= 40	neu= 0.0015	moment= 2.2743	te= -2541.1151651	err= -2.109
itr= 41	neu= -0.0028	moment= 2.2764	te= -2541.1151625	err= -2.002
itr= 42	neu= -0.0058	moment= 2.2788	te= -2541.1151591	err= -1.934
itr= 43	neu= -0.0075	moment= 2.2812	te= -2541.1151560	err= -1.903
itr= 44	neu= -0.0081	moment= 2.2834	te= -2541.1151539	err= -1.905
itr= 45	neu= -0.0079	moment= 2.2853	te= -2541.1151534	err= -1.938
itr= 46	neu= -0.0073	moment= 2.2867	te= -2541.1151543	err= -1.999
itr= 47	neu= -0.0064	moment= 2.2877	te= -2541.1151563	err= -2.049
itr= 48	neu= -0.0054	moment= 2.2882	te= -2541.1151587	err= -2.128
itr= 49	neu= -0.0043	moment= 2.2883	te= -2541.1151613	err= -2.243
itr= 50	neu= -0.0032	moment= 2.2880	te= -2541.1151635	err= -2.405
itr= 51	neu= -0.0021	moment= 2.2874	te= -2541.1151654	err= -2.616
itr= 52	neu= -0.0011	moment= 2.2866	te= -2541.1151668	err= -2.682
itr= 53	neu= -0.0001	moment= 2.2857	te= -2541.1151680	err= -2.522
itr= 54	neu= 0.0008	moment= 2.2848	te= -2541.1151688	err= -2.444
itr= 55	neu= 0.0016	moment= 2.2840	te= -2541.1151695	err= -2.418
itr= 56	neu= 0.0021	moment= 2.2832	te= -2541.1151700	err= -2.432
itr= 57	neu= 0.0025	moment= 2.2825	te= -2541.1151704	err= -2.482
itr= 58	neu= 0.0026	moment= 2.2821	te= -2541.1151705	err= -2.552
itr= 59	neu= 0.0025	moment= 2.2818	te= -2541.1151705	err= -2.655
itr= 60	neu= 0.0022	moment= 2.2816	te= -2541.1151702	err= -2.816
itr= 61	neu= 0.0017	moment= 2.2817	te= -2541.1151697	err= -3.084
itr= 62	neu= 0.0011	moment= 2.2818	te= -2541.1151692	err= -3.349
itr= 63	neu= 0.0005	moment= 2.2821	te= -2541.1151687	err= -3.014
itr= 64	neu= -0.0001	moment= 2.2824	te= -2541.1151682	err= -2.854
itr= 65	neu= -0.0006	moment= 2.2828	te= -2541.1151679	err= -2.775
itr= 66	neu= -0.0010	moment= 2.2831	te= -2541.1151677	err= -2.746
itr= 67	neu= -0.0012	moment= 2.2834	te= -2541.1151677	err= -2.755
itr= 68	neu= -0.0014	moment= 2.2837	te= -2541.1151679	err= -2.800
itr= 69	neu= -0.0013	moment= 2.2839	te= -2541.1151681	err= -2.883
itr= 70	neu= -0.0012	moment= 2.2841	te= -2541.1151684	err= -2.991
itr= 71	neu= -0.0010	moment= 2.2841	te= -2541.1151687	err= -3.149
itr= 72	neu= -0.0007	moment= 2.2841	te= -2541.1151690	err= -3.417
itr= 73	neu= -0.0004	moment= 2.2840	te= -2541.1151693	err= -3.771
itr= 74	neu= -0.0001	moment= 2.2839	te= -2541.1151695	err= -3.371
itr= 75	neu= 0.0001	moment= 2.2838	te= -2541.1151696	err= -3.198
itr= 76	neu= 0.0003	moment= 2.2836	te= -2541.1151697	err= -3.114
itr= 77	neu= 0.0004	moment= 2.2835	te= -2541.1151698	err= -3.081
itr= 78	neu= 0.0005	moment= 2.2833	te= -2541.1151698	err= -3.086
itr= 79	neu= 0.0006	moment= 2.2832	te= -2541.1151698	err= -3.124
itr= 80	neu= 0.0005	moment= 2.2831	te= -2541.1151697	err= -3.195
itr= 81	neu= 0.0005	moment= 2.2831	te= -2541.1151696	err= -3.296
itr= 82	neu= 0.0004	moment= 2.2830	te= -2541.1151695	err= -3.420

```

itr= 83 neu= 0.0003 moment= 2.2830 te= -2541.1151694 err= -3.603
itr= 84 neu= 0.0002 moment= 2.2831 te= -2541.1151693 err= -3.892
itr= 85 neu= 0.0001 moment= 2.2831 te= -2541.1151692 err= -4.067
itr= 86 neu= 0.0000 moment= 2.2831 te= -2541.1151692 err= -3.750
itr= 87 neu= -0.0001 moment= 2.2832 te= -2541.1151691 err= -3.616
itr= 88 neu= -0.0001 moment= 2.2833 te= -2541.1151691 err= -3.558
itr= 89 neu= -0.0002 moment= 2.2833 te= -2541.1151691 err= -3.546
itr= 90 neu= -0.0002 moment= 2.2834 te= -2541.1151691 err= -3.572
itr= 91 neu= -0.0002 moment= 2.2834 te= -2541.1151691 err= -3.631
itr= 92 neu= -0.0002 moment= 2.2834 te= -2541.1151691 err= -3.730
itr= 93 neu= -0.0002 moment= 2.2835 te= -2541.1151691 err= -3.851
itr= 94 neu= -0.0001 moment= 2.2835 te= -2541.1151692 err= -4.029
itr= 95 neu= -0.0001 moment= 2.2835 te= -2541.1151692 err= -4.331
itr= 96 neu= -0.0001 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -4.571
itr= 97 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151693 err= -4.200
itr= 98 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151693 err= -4.046
itr= 99 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151693 err= -3.976
itr=100 neu= 0.0001 moment= 2.2834 te= -2541.1151693 err= -3.955
itr=101 neu= 0.0001 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -3.971
itr=102 neu= 0.0001 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -4.020
itr=103 neu= 0.0001 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -4.105
itr=104 neu= 0.0001 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -4.224
itr=105 neu= 0.0001 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -4.376
itr=106 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151692 err= -4.616
itr=107 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151692 err= -5.109
itr=108 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151692 err= -4.726
itr=109 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151692 err= -4.517
itr=110 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151692 err= -4.422
itr=111 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151692 err= -4.385
itr=112 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151692 err= -4.388
itr=113 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -4.424
itr=114 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -4.495
itr=115 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -4.605
itr=116 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -4.733
itr=117 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -4.926
itr=118 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -5.258
itr=119 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -5.349
itr=120 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -5.030
itr=121 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -4.897
itr=122 neu= 0.0000 moment= 2.2834 te= -2541.1151692 err= -4.839
itr=123 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151692 err= -4.827
itr=124 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -4.851
itr=125 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -4.908
itr=126 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -5.003
itr=127 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -5.126
itr=128 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -5.293
itr=129 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -5.568
itr=130 neu= 0.0000 moment= 2.2833 te= -2541.1151693 err= -6.006
interval=130      cpu time= 325.00 sec
sdftyp=vmw      reltyp=sra      dmpc=0.010
Fe
itr=130 neu 0.0000 chr,spn 8.0000 2.2833 intc,ints 0.9946 -0.0449
rms err= -6.201 -6.006
ef= 0.6774652 0.6917143 def= 11.7386737 5.6457414
total energy= -2541.1151693

```

```

*** type-Fe      Fe (z= 26.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =17.9837291
valence charge in the cell (spin up ) = 0.20778(s) 0.20049(p) 4.26614(d)
valence charge in the cell (spin down) = 0.21396(s) 0.23159(p) 1.90167(d)
total charge= 25.00536 valence charge (up/down)= 4.67441 2.34723
spin moment= 2.32718 orbital moment= 0.00000

core level (spin up )

```

-511.9146371 Ry(1s)	-58.9063790 Ry(2s)	-50.0792479 Ry(2p)		
-5.7292734 Ry(3s)	-3.2625491 Ry(3p)			
core level (spin down)				
-511.8999538 Ry(1s)	-58.7969818 Ry(2s)	-49.9915968 Ry(2p)		
-5.5225364 Ry(3s)	-3.0623340 Ry(3p)			
hyperfine field of Fe				
-286.358 KG (core= -249.452 KG valence= -36.906 KG)				
core contribution				
-19.889 KG(1s)	-543.133 KG(2s)	313.571 KG(3s)		
charge density at the nucleus				
15003.9491 (core= 14996.7008 valence= 7.0569)				
core contribution				
13542.1678(1s)	1269.7639(2s)	184.7691(3s)		
sbttime report				
routine	1	2	3	4
count	66560	66560	66560	260
cpu(sec)	170.00	99.00	43.00	1.00
cpu used	326.00 sec			

アウトプットファイルには日付、配列に関するパラメータ、インプットファイルの内容表示、複素平面のエネルギーメッシュ、インプットファイルの入力パラメータ、マフィンティン半径、構造定数の計算に必要な数値などが計算されて出力されるが、specx.f で設定した値を超えるとエラーメッセージを出力して終了するので、その場合はパラメータを再設定して計算する。

入力パラメータとして"record = init"を指定した場合、または指定したポテンシャルファイルが存在しない場合は、原子の電子計算から初期ポテンシャルが構成される。この場合、"record = 2nd"とすることで、計算は既存のファイルの2nd record から出発することになる。

続いてcoreの電子配置、iteration計算が収束していく様子、フェルミレベルなどの基本的な計算結果、得られた電子状態から計算した物理量などが出力され、最後に計算時間が出力される。計算時間は、ポテンシャルデータが存在するかによって同じ入力でも変わってくる。すでに存在しているものを使用すれば収束計算が短くなるので、計算時間も大幅に短くなる。

(6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

入力パラメータの第1項目をdosにすると、ポテンシャルファイルを使用して状態密度を出力する。これを以下に表示する。

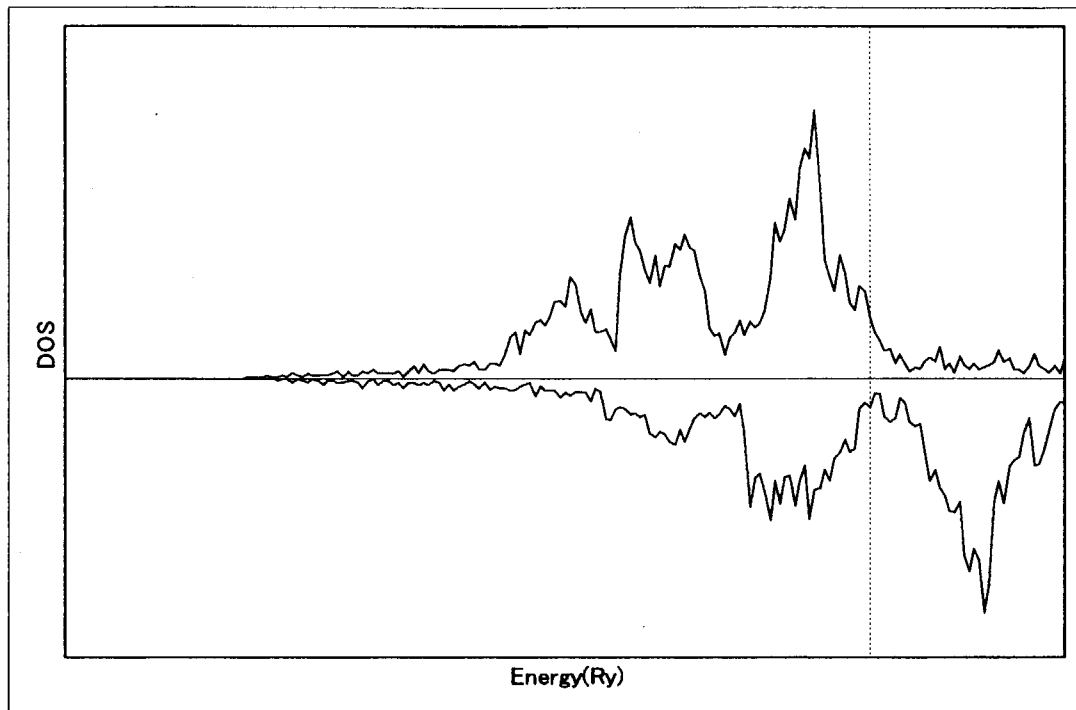


図 2-1 Fe の計算結果

片方のスピンの d バンドはほとんど占有され、フェルミレベルはもう一方のスピンバンドの中央の谷に位置するようになる。この谷は直観的には結合、反結合軌道の形成に対応している。

2.3. ニッケル(Ni)の解析

(1) サンプル問題の物理的な条件

Ni についての電子状態計算を行い、状態密度から電子状態および化学結合の様子を理解する。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

入力条件は、前節の(2)で述べたものと同様である。

(3) 入力データ

インプットファイルを以下のように作成する。

```

c----- 0-----
go  data/ni
fcc  6.65 . . . . .
0.001 2.0 nrl m'jw mag 2nd
update 8 40 0.024
|
Ni 1 0 0 2 28 100
|
0.00000 0.00000 0.00000 Ni
    
```

(4) 計算実行方法

実行方法は、2.1 節の(3)で述べたとおりである。

nl	cnf	energy
1s	2.000	-595.8142
2s	2.000	-70.7050
2p	6.000	-61.8163
3s	2.000	-7.9863
3p	6.000	-5.2730
3d	8.000	-0.7806
4s	2.000	-0.5252

record 1 will be overlaid by input and
record 2 will be replaced by new output.

core configuration for Z= 28

state	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	5s	5p	4f	5d	6s	6p	5f	6d	7s
up	1	1	3	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
down	1	1	3	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

**** self-consistent iteration starts ****

Ni

itr= 1	neu= 0.7841	moment= -0.0127	te= -3011.0046876	err= 0.140
itr= 2	neu= 0.6754	moment= 0.1107	te= -3011.4896043	err= -0.312
itr= 3	neu= 0.5048	moment= 0.3251	te= -3011.6272219	err= -0.536
itr= 4	neu= -0.5719	moment= 0.3277	te= -3011.6183392	err= -0.437
itr= 5	neu= -0.8290	moment= 0.4669	te= -3011.6303352	err= -0.540
itr= 6	neu= -0.5394	moment= 0.6945	te= -3011.6316694	err= -0.586
itr= 7	neu= -0.2699	moment= 0.5744	te= -3011.6325869	err= -0.745
itr= 8	neu= -0.1350	moment= 0.6072	te= -3011.6339806	err= -0.875
itr= 9	neu= 0.0158	moment= 0.5842	te= -3011.6345406	err= -0.938
itr= 10	neu= 0.1504	moment= 0.5739	te= -3011.6348400	err= -0.885
itr= 11	neu= 0.2178	moment= 0.5663	te= -3011.6350673	err= -0.890
itr= 12	neu= 0.1949	moment= 0.5687	te= -3011.6348423	err= -0.910
itr= 13	neu= 0.1174	moment= 0.5601	te= -3011.6342686	err= -0.888
itr= 14	neu= 0.0163	moment= 0.5485	te= -3011.6342282	err= -0.978
itr= 15	neu= -0.0728	moment= 0.5465	te= -3011.6345569	err= -1.120
itr= 16	neu= -0.1117	moment= 0.5474	te= -3011.6347820	err= -1.168
itr= 17	neu= -0.1336	moment= 0.5504	te= -3011.6350078	err= -1.330
itr= 18	neu= -0.1263	moment= 0.5475	te= -3011.6350132	err= -1.381
itr= 19	neu= -0.1015	moment= 0.5468	te= -3011.6349822	err= -1.402
itr= 20	neu= -0.0724	moment= 0.5486	te= -3011.6348562	err= -1.413
itr= 21	neu= -0.0248	moment= 0.5503	te= -3011.6347921	err= -1.537
itr= 22	neu= 0.0105	moment= 0.5530	te= -3011.6348181	err= -1.599
itr= 23	neu= 0.0267	moment= 0.5553	te= -3011.6348490	err= -1.657
itr= 24	neu= 0.0287	moment= 0.5562	te= -3011.6348602	err= -1.686
itr= 25	neu= 0.0211	moment= 0.5559	te= -3011.6348545	err= -1.706
itr= 26	neu= 0.0093	moment= 0.5554	te= -3011.6348489	err= -1.767
itr= 27	neu= -0.0030	moment= 0.5551	te= -3011.6348492	err= -1.851
itr= 28	neu= -0.0132	moment= 0.5545	te= -3011.6348534	err= -1.912
itr= 29	neu= -0.0193	moment= 0.5537	te= -3011.6348600	err= -1.955
itr= 30	neu= -0.0213	moment= 0.5529	te= -3011.6348675	err= -2.021
itr= 31	neu= -0.0198	moment= 0.5524	te= -3011.6348745	err= -2.123
itr= 32	neu= -0.0160	moment= 0.5521	te= -3011.6348803	err= -2.177
itr= 33	neu= -0.0112	moment= 0.5520	te= -3011.6348851	err= -2.225
itr= 34	neu= -0.0065	moment= 0.5522	te= -3011.6348893	err= -2.288
itr= 35	neu= -0.0027	moment= 0.5524	te= -3011.6348928	err= -2.371
itr= 36	neu= -0.0001	moment= 0.5527	te= -3011.6348957	err= -2.446
itr= 37	neu= 0.0012	moment= 0.5531	te= -3011.6348978	err= -2.472
itr= 38	neu= 0.0014	moment= 0.5534	te= -3011.6348991	err= -2.513
itr= 39	neu= 0.0008	moment= 0.5536	te= -3011.6348999	err= -2.571
itr= 40	neu= -0.0002	moment= 0.5538	te= -3011.6349006	err= -2.641

*** no convergence

interval= 40 cpu time= 42.00 sec
sdftyp=mjw reltyp=nrl dmpc=0.024

Ni

itr= 40 neu -0.0002 chr, spn 10.0000 0.5538 intc, ints 0.7088 -0.0199
rms err= -2.641 -2.656
ef= 0.6565264 0.6658796 def= 3.6738415 22.8968810
total energy= -3011.6349006


```

*** type-Ni      Ni (z= 28.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =17.9931687
valence charge in the cell (spin up ) =  0.23284 (s)  0.22518 (p)  4.47773 (d)
valence charge in the cell (spin down) =  0.23670 (s)  0.24073 (p)  3.88481 (d)
total charge= 27.29117  valence charge (up/down)=  4.93575  4.36224
spin moment=  0.57351  orbital moment=  0.00000

```

```

core level (spin up )
-594.4333872 Ry(1s)      -69.3363279 Ry(2s)      -60.4450279 Ry(2p)
-6.6432713 Ry(3s)      -3.9351736 Ry(3p)
core level (spin down)
-594.4237855 Ry(1s)      -69.2978110 Ry(2s)      -60.4135779 Ry(2p)
-6.5825887 Ry(3s)      -3.8759688 Ry(3p)

```

```

hyperfine field of Ni
-83.728 KG (core= -61.853 KG  valence= -21.875 KG )
core contribution
-7.148 KG(1s)      -156.890 KG(2s)      102.185 KG(3s)

```

```

charge density at the nucleus
14827.6940 (core= 14821.8238  valence= 5.8702 )
core contribution
13396.9177(1s)      1243.2068(2s)      181.6992(3s)

```

```

sbttime report
routine      1      2      3      4
count      11600  11600  11600   80
cpu(sec)    19.00  11.00   9.00   0.00

cpu used      43.00 sec

```

アウトプットファイルの出力項目は、Feの時と同様である。計算時間は、ポテンシャルデータが無い状態で新しく計算しているが、それでも1分程度である。

(6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

上記(5)の計算結果では、収束状況がまだ不十分の様子なので、このとき計算したポテンシャルデータを使用して状態密度を再計算する。これを以下に表示する。

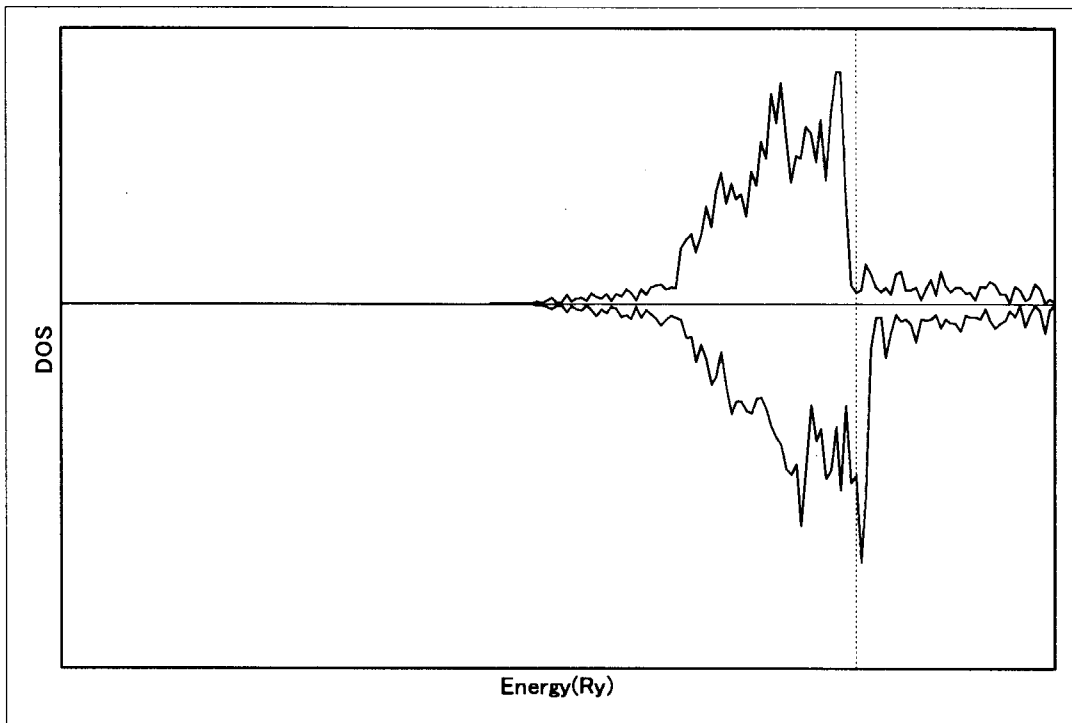


図 2-2 Ni の計算結果

片方のバンドがほぼ占有され、もう一方のバンドにホールができていいるのは Fe の場合と似ているが、フェルミレベル付近での状態密度は高く急激な変化を示している。このような場合、フェルミレベルの少しの変化に対して計算が敏感に反応するので、慎重に計算を進める必要がある。

2.4. 格子定数を変化させた鉄(Fe)の解析

(1) サンプル問題の物理的な条件

2.2 節で計算した Fe について、格子定数を変化させた場合の状態密度の変化を見る。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

格子定数を 5.1、5.2、5.3、5.4、5.5 と変化させる。

(3) 入力データ

インプットファイルを以下のように作成する。このように、ひとつのインプットファイルの中に複数の入力パラメータセットを続けて書いておくと、電子状態計算は連続して行われる。

```

c----- 1-----
go  data/fe
bcc  5.1 , , , , ,
0.001 2.0 nr1 mjwasa mag init
update 5 60 0.034
1
Fe 1 0 0 2 26 100
1
0.00000 0.00000 0.00000 Fe
c----- 2-----
go  data/fe
bcc  5.2 , , , , ,
    
```

```

0.001 2.0 nrl mjwasa mag 2nd
update 5 40 0.034
1
Fe 1 0 0 2 26 100
1
0.00000 0.00000 0.00000 Fe
c----- 3-----
go data/fe
bcc 5.3 , , , , ,
0.001 2.0 nrl mjwasa mag 2nd
update 5 40 0.034
1
Fe 1 0 0 2 26 100
1
0.00000 0.00000 0.00000 Fe
c----- 4-----
go data/fe
bcc 5.4 , , , , ,
0.001 2.0 nrl mjwasa mag 2nd
update 5 40 0.034
1
Fe 1 0 0 2 26 100
1
0.00000 0.00000 0.00000 Fe
c----- 5-----
go data/fe
bcc 5.5 , , , , ,
0.001 2.0 nrl mjwasa mag 2nd
update 5 40 0.034
1
Fe 1 0 0 2 26 100
1
0.00000 0.00000 0.00000 Fe

```

(4) 計算実行方法

実行方法は、2.1節の(3)で述べたとおりである。

(5) 計算結果

計算結果を以下に示す。

```

10-Oct-2002
meshr mse ng mxl
400 35 15 3

data read in
go=go file=data/fe
brvtyp=bcc a= 5.10000 c/a=0.00000 b/a=0.00000
alpha= 0.0 beta= 0.0 gamma= 0.0
edelt= 0.0010 ewidth= 2.000 reltyp=nrl sdftyp=mjwasa magtyp=mag
record=init outtyp=update bzqlty=5 maxitr= 60 pmix=0.03400
ntyp= 1 natm= 1 ncmpx= 1

complex energy mesh
1(-2.0000, 0.0000) 2(-1.9998, 0.0041) 3(-1.9989, 0.0095)
4(-1.9965, 0.0168) 5(-1.9913, 0.0263) 6(-1.9810, 0.0388)
7(-1.9620, 0.0546) 8(-1.9286, 0.0742) 9(-1.8730, 0.0976)
10(-1.7856, 0.1238) 11(-1.6574, 0.1507) 12(-1.4839, 0.1750)
13(-1.2692, 0.1926) 14(-1.0291, 0.1999) 15(-0.7873, 0.1954)
16(-0.5679, 0.1804) 17(-0.3876, 0.1581) 18(-0.2518, 0.1327)
19(-0.1569, 0.1076) 20(-0.0946, 0.0849) 21(-0.0555, 0.0657)
22(-0.0319, 0.0501) 23(-0.0181, 0.0378) 24(-0.0101, 0.0284)
25(-0.0056, 0.0212) 26(-0.0031, 0.0157) 27(-0.0017, 0.0116)
28(-0.0009, 0.0086) 29(-0.0005, 0.0064) 30(-0.0003, 0.0047)

```



```

itr= 11 neu= -0.1800 moment= 0.5329 te= -2522.8056206 err= -1.087
itr= 12 neu= -0.0652 moment= 0.8125 te= -2522.8082199 err= -1.102
itr= 13 neu= -0.0893 moment= 1.1089 te= -2522.8128308 err= -1.116
itr= 14 neu= -0.0873 moment= 1.3890 te= -2522.8175138 err= -1.175
itr= 15 neu= 0.1403 moment= 1.6889 te= -2522.8213214 err= -1.115
itr= 16 neu= -0.0486 moment= 1.8802 te= -2522.8235247 err= -1.184
itr= 17 neu= -0.0352 moment= 1.9504 te= -2522.8241239 err= -1.295
itr= 18 neu= -0.0392 moment= 2.0598 te= -2522.8239581 err= -1.279
itr= 19 neu= 0.0172 moment= 2.0754 te= -2522.8240745 err= -1.397
itr= 20 neu= -0.0485 moment= 2.0641 te= -2522.8243307 err= -1.640
itr= 21 neu= -0.0479 moment= 2.0600 te= -2522.8244315 err= -2.097
itr= 22 neu= -0.0134 moment= 2.0019 te= -2522.8245459 err= -1.642
itr= 23 neu= -0.0150 moment= 1.9720 te= -2522.8246170 err= -1.557
itr= 24 neu= -0.0027 moment= 1.9615 te= -2522.8245873 err= -1.625
itr= 25 neu= 0.0086 moment= 1.9501 te= -2522.8245575 err= -1.709
itr= 26 neu= 0.0114 moment= 1.9481 te= -2522.8245256 err= -1.897
itr= 27 neu= 0.0110 moment= 1.9503 te= -2522.8244962 err= -2.279
itr= 28 neu= 0.0094 moment= 1.9558 te= -2522.8244720 err= -2.420
itr= 29 neu= 0.0067 moment= 1.9632 te= -2522.8244580 err= -2.166
itr= 30 neu= 0.0040 moment= 1.9680 te= -2522.8244570 err= -2.114
itr= 31 neu= 0.0006 moment= 1.9702 te= -2522.8244661 err= -2.142
itr= 32 neu= -0.0022 moment= 1.9708 te= -2522.8244811 err= -2.272
itr= 33 neu= -0.0034 moment= 1.9704 te= -2522.8244966 err= -2.531
itr= 34 neu= -0.0033 moment= 1.9695 te= -2522.8245085 err= -3.075
itr= 35 neu= -0.0025 moment= 1.9685 te= -2522.8245156 err= -2.921
itr= 36 neu= -0.0014 moment= 1.9676 te= -2522.8245183 err= -2.741
itr= 37 neu= -0.0004 moment= 1.9670 te= -2522.8245179 err= -2.707
itr= 38 neu= 0.0004 moment= 1.9669 te= -2522.8245157 err= -2.786
itr= 39 neu= 0.0009 moment= 1.9670 te= -2522.8245126 err= -2.970
itr= 40 neu= 0.0010 moment= 1.9672 te= -2522.8245096 err= -3.323
itr= 41 neu= 0.0009 moment= 1.9675 te= -2522.8245073 err= -3.949
itr= 42 neu= 0.0006 moment= 1.9678 te= -2522.8245060 err= -3.471
itr= 43 neu= 0.0003 moment= 1.9679 te= -2522.8245055 err= -3.354
itr= 44 neu= 0.0000 moment= 1.9680 te= -2522.8245058 err= -3.380
itr= 45 neu= -0.0002 moment= 1.9680 te= -2522.8245064 err= -3.515
itr= 46 neu= -0.0002 moment= 1.9679 te= -2522.8245071 err= -3.782
itr= 47 neu= -0.0002 moment= 1.9678 te= -2522.8245076 err= -4.389
itr= 48 neu= -0.0002 moment= 1.9678 te= -2522.8245081 err= -4.238
itr= 49 neu= -0.0001 moment= 1.9677 te= -2522.8245082 err= -4.022
itr= 50 neu= 0.0000 moment= 1.9677 te= -2522.8245082 err= -3.995
itr= 51 neu= 0.0000 moment= 1.9677 te= -2522.8245082 err= -4.085
itr= 52 neu= 0.0000 moment= 1.9677 te= -2522.8245080 err= -4.286
itr= 53 neu= 0.0001 moment= 1.9677 te= -2522.8245079 err= -4.676
itr= 54 neu= 0.0000 moment= 1.9678 te= -2522.8245077 err= -5.311
itr= 55 neu= 0.0000 moment= 1.9678 te= -2522.8245077 err= -4.781
itr= 56 neu= 0.0000 moment= 1.9678 te= -2522.8245076 err= -4.673
itr= 57 neu= 0.0000 moment= 1.9678 te= -2522.8245076 err= -4.718
itr= 58 neu= 0.0000 moment= 1.9678 te= -2522.8245077 err= -4.875
itr= 59 neu= 0.0000 moment= 1.9678 te= -2522.8245077 err= -5.178
itr= 60 neu= 0.0000 moment= 1.9678 te= -2522.8245077 err= -5.988

```

```

*** no convergence
interval= 60      cpu time= 31.00 sec
sdftyp=mjw      reltyp=nrl      dmpe=0.034
Fe
itr= 60 neu 0.0000 chr,spn 8.0000 1.9678 intc,ints 0.0000 0.0000
rms err= -5.988 -6.378
ef= 0.6964165 0.6964165 def= 8.9821678 3.1947886
total energy= -2522.8245077

```

```

*** type-Fe      Fe (z= 26.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =18.0000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.30658(s) 0.38094(p) 4.29637(d)
valence charge in the cell (spin down) = 0.31302(s) 0.42152(p) 2.28158(d)
total charge= 26.00000 valence charge (up/down)= 4.98388 3.01612

```

spin moment= 1.96777 orbital moment= 0.00000

core level (spin up)
 -507.1627952 Ry(1s) -57.9117692 Ry(2s) -49.8733061 Ry(2p)
 -5.5576694 Ry(3s) -3.2152138 Ry(3p)
 core level (spin down)
 -507.1623967 Ry(1s) -57.8267370 Ry(2s) -49.8086214 Ry(2p)
 -5.3911194 Ry(3s) -3.0538668 Ry(3p)

hyperfine field of Fe
 -226.722 KG (core= -197.587 KG valence= -29.135 KG)
 core contribution
 -16.752 KG(1s) -450.794 KG(2s) 269.959 KG(3s)

charge density at the nucleus
 11820.9190 (core= 11814.4460 valence= 6.4730)
 core contribution
 10701.2812(1s) 972.6483(2s) 140.5166(3s)

sftime report

routine	1	2	3	4
count	5640	5640	5640	120
cpu(sec)	20.00	3.00	3.00	0.00

meshr	mse	ng	mxl
400	35	15	3

data read in

go=go file=data/fe
 brvtyp=bcc a= 5.20000 c/a=0.00000 b/a=0.00000
 alpha= 0.0 beta= 0.0 gamma= 0.0
 edelt= 0.0010 ewidth= 2.000 reltyp=nrl sdftyp=mjwasa magtyp=mag
 record=2nd outtyp=update bzqlty=5 maxitr= 40 pmix=0.03400
 ntyp= 1 natm= 1 ncmpx= 1

complex energy mesh

1(-2.0000, 0.0000)	2(-1.9998, 0.0041)	3(-1.9989, 0.0095)
4(-1.9965, 0.0168)	5(-1.9913, 0.0263)	6(-1.9810, 0.0388)
7(-1.9620, 0.0546)	8(-1.9286, 0.0742)	9(-1.8730, 0.0976)
10(-1.7856, 0.1238)	11(-1.6574, 0.1507)	12(-1.4839, 0.1750)
13(-1.2692, 0.1926)	14(-1.0291, 0.1999)	15(-0.7873, 0.1954)
16(-0.5679, 0.1804)	17(-0.3876, 0.1581)	18(-0.2518, 0.1327)
19(-0.1569, 0.1076)	20(-0.0946, 0.0849)	21(-0.0555, 0.0657)
22(-0.0319, 0.0501)	23(-0.0181, 0.0378)	24(-0.0101, 0.0284)
25(-0.0056, 0.0212)	26(-0.0031, 0.0157)	27(-0.0017, 0.0116)
28(-0.0009, 0.0086)	29(-0.0005, 0.0064)	30(-0.0003, 0.0047)
31(-0.0001, 0.0035)	32(-0.0001, 0.0026)	33(0.0000, 0.0019)
34(0.0000, 0.0014)	35(0.0000, 0.0010)	

file to be accessed=data/fe
 rmt(1)= 0.4923725

lattice constant

bravais=bcc a= 5.20000 c/a=1.0000 b/a=1.0000
 alpha= 90.00 beta= 90.00 gamma= 90.00

type of site

type=Fe rmt=0.49237 field= 0.000 lmxtyp= 2
 component= 1 anclr= 26. conc= 1.0000

atoms in the unit cell

position= 0.00000000 0.00000000 0.00000000 type=Fe

*** type-Fe Fe (z= 26.0) ***
 core charge in the muffin-tin sphere =18.000000
 valence charge in the cell (spin up) = 0.30690(s) 0.37328(p) 4.37908(d)
 valence charge in the cell (spin down) = 0.31771(s) 0.42355(p) 2.19949(d)
 total charge= 26.00000 valence charge (up/down)= 5.05926 2.94074
 spin moment= 2.11851 orbital moment= 0.00000

core level (spin up)
 -507.2091663 Ry(1s) -57.9577689 Ry(2s) -49.9189527 Ry(2p)
 -5.6042654 Ry(3s) -3.2610841 Ry(3p)
 core level (spin down)
 -507.2087863 Ry(1s) -57.8663670 Ry(2s) -49.8494393 Ry(2p)
 -5.4247650 Ry(3s) -3.0870860 Ry(3p)

hyperfine field of Fe
 -263.324 KG (core= -215.586 KG valence= -47.738 KG)
 core contribution
 -18.016 KG(1s) -484.925 KG(2s) 287.355 KG(3s)

charge density at the nucleus
 11820.6609 (core= 11814.5453 valence= 6.1156)
 core contribution
 10701.2991(1s) 972.6711(2s) 140.5751(3s)

sftime report

routine	1	2	3	4
count	3760	3760	3760	80
cpu(sec)	11.00	2.00	2.00	0.00

meshr	mse	ng	mxl
400	35	15	3

data read in
 go=go file=data/fe
 brvtyp=bcc a= 5.30000 c/a=0.00000 b/a=0.00000
 alpha= 0.0 beta= 0.0 gamma= 0.0
 edelt= 0.0010 ewidth= 2.000 reltyp=rnl sdftyp=mjwasa magtyp=mag
 record=2nd outtyp=update bzqity=5 maxitr= 40 pmix=0.03400
 ntyp= 1 natm= 1 ncmpx= 1

complex energy mesh
 1(-2.0000, 0.0000) 2(-1.9998, 0.0041) 3(-1.9989, 0.0095)
 4(-1.9965, 0.0168) 5(-1.9913, 0.0263) 6(-1.9810, 0.0388)
 7(-1.9620, 0.0546) 8(-1.9286, 0.0742) 9(-1.8730, 0.0976)
 10(-1.7856, 0.1238) 11(-1.6574, 0.1507) 12(-1.4839, 0.1750)
 13(-1.2692, 0.1926) 14(-1.0291, 0.1999) 15(-0.7873, 0.1954)
 16(-0.5679, 0.1804) 17(-0.3876, 0.1581) 18(-0.2518, 0.1327)
 19(-0.1569, 0.1076) 20(-0.0946, 0.0849) 21(-0.0555, 0.0657)
 22(-0.0319, 0.0501) 23(-0.0181, 0.0378) 24(-0.0101, 0.0284)
 25(-0.0056, 0.0212) 26(-0.0031, 0.0157) 27(-0.0017, 0.0116)
 28(-0.0009, 0.0086) 29(-0.0005, 0.0064) 30(-0.0003, 0.0047)
 31(-0.0001, 0.0035) 32(-0.0001, 0.0026) 33(-0.0000, 0.0019)
 34(0.0000, 0.0014) 35(0.0000, 0.0010)

file to be accessed=data/fe
 rmt(1)= 0.4923725

lattice constant
 bravais=bcc a= 5.30000 c/a=1.0000 b/a=1.0000
 alpha= 90.00 beta= 90.00 gamma= 90.00

ef= 0.5933678 0.5933678 def= 27.0691391 0.4392501
 total energy= -2522.8344561

*** type-Fe Fe (z= 26.0) ***
 core charge in the muffin-tin sphere =18.0000000
 valence charge in the cell (spin up) = 0.30750(s) 0.36472(p) 4.39327(d)
 valence charge in the cell (spin down) = 0.32130(s) 0.42328(p) 2.18993(d)
 total charge= 26.00000 valence charge (up/down)= 5.06549 2.93451
 spin moment= 2.13099 orbital moment= 0.00000

core level (spin up)
 -507.2545558 Ry(1s) -58.0004165 Ry(2s) -49.9618848 Ry(2p)
 -5.6441233 Ry(3s) -3.3003756 Ry(3p)
 core level (spin down)
 -507.2542137 Ry(1s) -57.9084508 Ry(2s) -49.8919576 Ry(2p)
 -5.4631991 Ry(3s) -3.1249083 Ry(3p)

hyperfine field of Fe
 -276.693 KG (core= -219.358 KG valence= -57.335 KG)
 core contribution
 -18.076 KG(1s) -488.160 KG(2s) 286.877 KG(3s)

charge density at the nucleus
 11820.4361 (core= 11814.6483 valence= 5.7878)
 core contribution
 10701.3131(1s) 972.6910(2s) 140.6441(3s)

sptime report

routine	1	2	3	4
count	3760	3760	3760	80
cpu(sec)	9.00	9.00	2.00	0.00

meshr mse ng mxl
 400 35 15 3

data read in
 go=go file=data/fe
 brvtyp=bcc a= 5.40000 c/a=0.00000 b/a=0.00000
 alpha= 0.0 beta= 0.0 gamma= 0.0
 edelt= 0.0010 ewidth= 2.000 reltyp=nrl sdftyp=mjwasa magtyp=mag
 record=2nd outtyp=update bzqity=5 maxitr= 40 pmix=0.03400
 ntyp= 1 natm= 1 ncmpx= 1

complex energy mesh
 1(-2.0000, 0.0000) 2(-1.9998, 0.0041) 3(-1.9989, 0.0095)
 4(-1.9965, 0.0168) 5(-1.9913, 0.0263) 6(-1.9810, 0.0388)
 7(-1.9620, 0.0546) 8(-1.9286, 0.0742) 9(-1.8730, 0.0976)
 10(-1.7856, 0.1238) 11(-1.6574, 0.1507) 12(-1.4839, 0.1750)
 13(-1.2692, 0.1926) 14(-1.0291, 0.1999) 15(-0.7873, 0.1954)
 16(-0.5679, 0.1804) 17(-0.3876, 0.1581) 18(-0.2518, 0.1327)
 19(-0.1569, 0.1076) 20(-0.0946, 0.0849) 21(-0.0555, 0.0657)
 22(-0.0319, 0.0501) 23(-0.0181, 0.0378) 24(-0.0101, 0.0284)
 25(-0.0056, 0.0212) 26(-0.0031, 0.0157) 27(-0.0017, 0.0116)
 28(-0.0009, 0.0086) 29(-0.0005, 0.0064) 30(-0.0003, 0.0047)
 31(-0.0001, 0.0035) 32(-0.0001, 0.0026) 33(0.0000, 0.0019)
 34(0.0000, 0.0014) 35(0.0000, 0.0010)


```
itr= 40 neu= -0.0001 moment= 2.1536 te= -2522.8324181 err= -4.733
*** no convergence
interval= 40 cpu time= 21.00 sec
sdftyp=mjw reltyp=nrl dmpc=0.034
Fe
itr= 40 neu -0.0001 chr, spn 8.0000 2.1536 intc, ints 0.0000 0.0000
rms err= -4.766 -4.733
ef= 0.5484678 0.5484678 def= 22.6405728 4.2143073
total energy= -2522.8324181
```

```
*** type-Fe Fe (z= 26.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =18.0000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.30826(s) 0.35552(p) 4.41301(d)
valence charge in the cell (spin down) = 0.32515(s) 0.42338(p) 2.17469(d)
total charge= 26.00000 valence charge (up/down)= 5.07679 2.92321
spin moment= 2.15357 orbital moment= 0.00000
```

```
core level (spin up )
-507.2947180 Ry(1s) -58.0382787 Ry(2s) -49.9999404 Ry(2p)
-5.6804959 Ry(3s) -3.3362864 Ry(3p)
core level (spin down)
-507.2944093 Ry(1s) -57.9452555 Ry(2s) -49.9292232 Ry(2p)
-5.4971880 Ry(3s) -3.1584273 Ry(3p)
```

```
hyperfine field of Fe
-290.271 KG (core= -224.158 KG valence= -66.113 KG )
core contribution
-18.228 KG(1s) -494.006 KG(2s) 288.076 KG(3s)
```

```
charge density at the nucleus
11820.2242 (core= 11814.7251 valence= 5.4991 )
core contribution
10701.3236(1s) 972.7079(2s) 140.6936(3s)
```

```
sptime report
routine 1 2 3 4
count 3760 3760 3760 80
cpu(sec) 11.00 3.00 2.00 0.00
```

```
meshr mse ng mxl
400 35 15 3
```

```
data read in
go=go file=data/fe
brvtyp=bcc a= 5.50000 c/a=0.00000 b/a=0.00000
alpha= 0.0 beta= 0.0 gamma= 0.0
edelt= 0.0010 ewidth= 2.000 reltyp=nrl sdftyp=mjwasa magtyp=mag
record=2nd outtyp=update bzqlty=5 maxitr= 40 pmix=0.03400
ntyp= 1 natm= 1 ncmpx= 1
```

```
complex energy mesh
1(-2.0000, 0.0000) 2(-1.9998, 0.0041) 3(-1.9989, 0.0095)
4(-1.9965, 0.0168) 5(-1.9913, 0.0263) 6(-1.9810, 0.0388)
7(-1.9620, 0.0546) 8(-1.9286, 0.0742) 9(-1.8730, 0.0976)
10(-1.7856, 0.1238) 11(-1.6574, 0.1507) 12(-1.4839, 0.1750)
13(-1.2692, 0.1926) 14(-1.0291, 0.1999) 15(-0.7873, 0.1954)
16(-0.5679, 0.1804) 17(-0.3876, 0.1581) 18(-0.2518, 0.1327)
```



```

itr= 33 neu= -0.0001 moment= 2.3086 te= -2522.8279226 err= -3.790
itr= 34 neu= -0.0001 moment= 2.3086 te= -2522.8279229 err= -4.007
itr= 35 neu= -0.0001 moment= 2.3086 te= -2522.8279231 err= -4.324
itr= 36 neu= 0.0000 moment= 2.3086 te= -2522.8279233 err= -4.752
itr= 37 neu= 0.0000 moment= 2.3086 te= -2522.8279234 err= -4.679
itr= 38 neu= 0.0000 moment= 2.3086 te= -2522.8279235 err= -4.589
itr= 39 neu= 0.0000 moment= 2.3086 te= -2522.8279235 err= -4.635
itr= 40 neu= 0.0000 moment= 2.3086 te= -2522.8279235 err= -4.776
*** no convergence
interval= 40      cpu time=    21.00 sec
sdftyp=mjw      reltyp=nrl      dmpr=0.034
Fe
itr= 40 neu 0.0000 chr,spn 8.0000 2.3086 intc, ints 0.0000 0.0000
rms err= -4.776 -4.810
ef= 0.5148906 0.5148906 def= 3.2557391 5.0612819
total energy= -2522.8279235

```

```

*** type-Fe      Fe (z= 26.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =18.0000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.30856(s) 0.34517(p) 4.50057(d)
valence charge in the cell (spin down) = 0.33067(s) 0.42587(p) 2.08916(d)
total charge= 26.00000 valence charge (up/down)= 5.15430 2.84570
spin moment= 2.30860 orbital moment= 0.00000

```

```

core level (spin up )
-507.3255326 Ry(1s)      -58.0692979 Ry(2s)      -50.0305070 Ry(2p)
-5.7151536 Ry(3s)      -3.3705811 Ry(3p)
core level (spin down)
-507.3252403 Ry(1s)     -57.9697645 Ry(2s)     -49.9548544 Ry(2p)
-5.5185099 Ry(3s)      -3.1796877 Ry(3p)

```

```

hyperfine field of Fe
-325.583 KG (core= -243.062 KG valence= -82.521 KG )
core contribution
-19.504 KG(1s)      -528.916 KG(2s)      305.358 KG(3s)

```

```

charge density at the nucleus
11820.0016 (core= 11814.7505 valence= 5.2511 )
core contribution
10701.3314(1s)      972.7228(2s)      140.6964(3s)

```

```

sbttime report
routine      1      2      3      4
count      3760  3760  3760   80
cpu(sec)    13.00  5.00  1.00  0.00
cpu used    116.00 sec

```

(6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

計算した状態密度を重ねて以下に表示する。見やすいように、格子定数が 5.1 と 5.5 の計算結果のみを表示している。格子定数の値を次第に大きくしていくと、状態密度の山がエネルギーの低い方へシフトする様子が見られる。

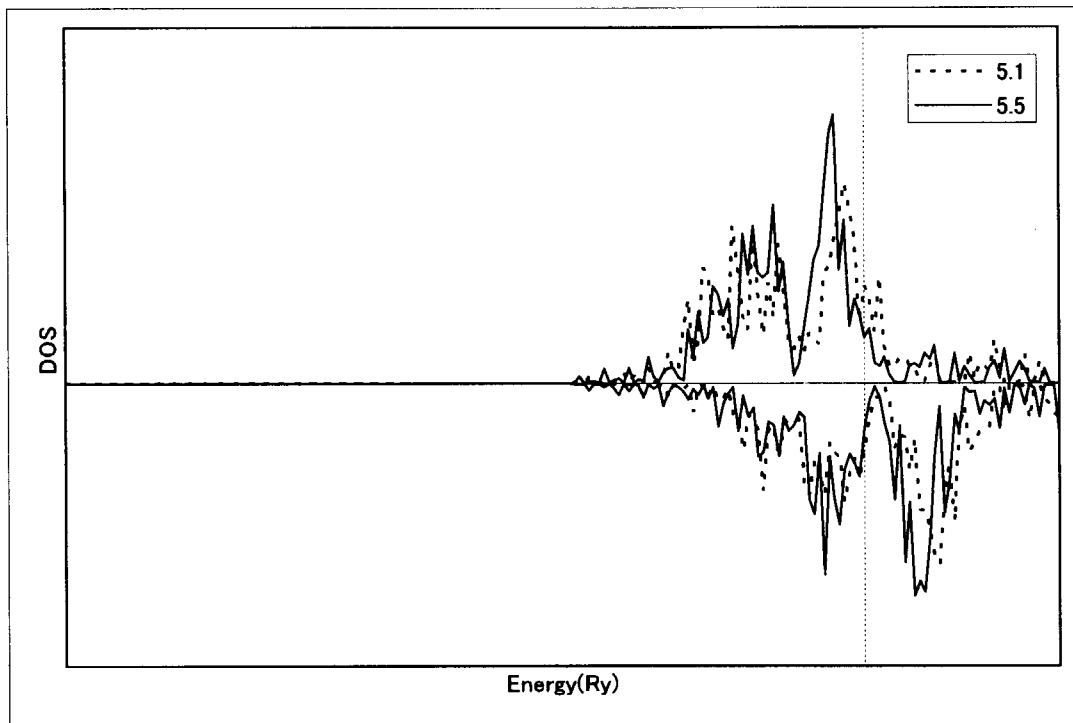


図 2-3 格子定数を変化させた Fe の計算結果

3. OSAKA-2000 の計算

大阪大学産業科学研究所 白井光雲氏らにより開発が行われている、擬ポテンシャルを使った第一原理計算プログラムパッケージである OSAKA-2000 version2 の導入と、(a)DOS 構造・バンド計算、(b)原子配置最適化、(c)分子動力学計算の実行方法の解説を行う。ただしいずれも計算の流れは、(1)擬ポテンシャルの作成、(2)結晶データの作成、(3)セルフコンシステントな電荷密度状態の計算、(4)計算問題の実行の順になるため、ここではまず、すべての問題で共通する(1)、(2)および(3)について述べた後、動作確認として実施した(a)、(b)および(c)について解説を行う。

本章で行った、プログラムの導入および動作確認として実施した計算の解説には、CMD ワークショップで使用した実習用テキストである、白井光雲氏による「[OSAKA2000]Input Guide」(<http://www.cmp.sanken.osaka-u.ac.jp/~koun/osaka2hp/files/inputguide.pdf>)を参考にした。

3.1. プログラム導入

(1) プログラムの入手

大阪大学の WEB サイト(<http://www.cmp.sanken.osaka-u.ac.jp/~koun/osaka.html>)においてユーザー登録を行い、ソースコード `osaka2k2.tar.gz`、実際の結晶に対してのインプット・アウトプットファイルの例 `stdata.tar.gz`、および原子ポテンシャルの作成データ `atomscripts.tar.gz` のダウンロードを行う。

必要に応じて、<http://www.cs.colorado.edu/~lapack/packages.html> などの WEB サイトから、数値計算ライブラリ LAPACK V3.0 Complete Package も入手する。

ホームディレクトリにダウンロードした上記のファイルを、以下の要領で展開する。最後に、OSAKA-2000 インストールディレクトリである `$HOME/osaka2k2` を、環境変数 `OSAKA2K` として登録している。

```
% cd $HOME
% tar xfv osaka2k2.tar.gz
% mv atomscripts.tar.gz osaka2k2
% mv stdata.tar.gz osaka2k2
% mv lapack.tgz osaka2k2
% cd osaka2k2
% tar xfv atomscripts.tar.gz
% tar xfv stdata.tar.gz
% tar xfv lapack.tgz
% export OSAKA2K=$HOME/osaka2k2
```

(2) プログラムの作成

OSAKA-2000 では、計算条件によってヘッダファイルを編集し、コンパイル・実行を行い、その結果を用いて次の計算を行う形態を取っている。そのため計算を行う際には、各ユーザがソースコードを自分のディレクトリに展開して、作業することになる。詳細な手順は次節以降に述べる。

(3) プログラムの実行

先に述べた通り、OSAKA-2000 におけるプログラム利用手順は解析対象によって異なる。詳細な手順については次節以降にあるので、ここでは概略についてのみ述べる。

以下の図は、OSAKA-2000 を用いたシミュレーションを行う際の計算の流れである。この図から判るとおり、OSAKA-2000 は多くのプログラムの集合体であり、それらの関係は次のようになっている。まず、atom および cryst で使用する原子ポテンシャルと結晶データを作成し、inip でプログラムサイズを決定する。次に、pwm でプログラムサイズに合わせて電子基底状態の計算を行う。これにより、セルフコンシステントな電荷分布密度を得て、そのデータを元に、band, doscl でバンド計算や DOS 構造、mds で第一原理分子動力学計算などを行う。

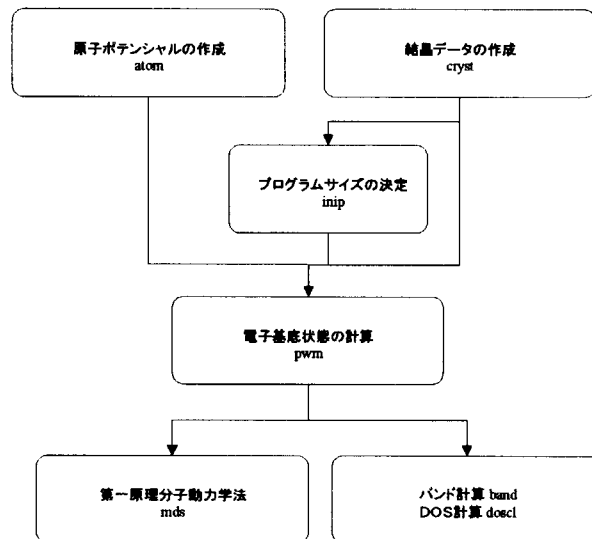


図 3-1 OSAKA-2000 の全体図

OSAKA-2000 では上記以外にも、大阪大学産業科学研究所 柳瀬章氏による、空間群関連のサブルーチンセットである TSPACE や、バンド構造作図プログラムである AYBAND などを使用している。これらに関しては、大阪大学の WEB サイト(<http://www.cmp.sanken.osaka-u.ac.jp/~yanase/>)に情報がある。

3.2. 擬ポテンシャルの作成

atom を用いて原子の擬ポテンシャルや擬波動関数が作成できる。本節では、この方法について述べる。

(1) サンプル問題の物理的な条件

ここでは、後述するサンプル問題で使用するシリコンの擬ポテンシャルデータの作成を行う。ポテンシャルの種類は Improved Troullier and Martins 型であり、電子の相関関数としてスピン無しの Ceperly-Alder 型相関関数を用いる。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

atom コードに対する入力は、原子データファイル atom.dat のみである。

(3) 入力データ

シリコン用の入力データの一例を以下に示す。入力データについての詳細は、前述の「[OSAKA2000]Input Guide」に詳しく述べられているため、ここでは省略する。

pg		Silicon				
tm2						
n=Si	c=ca					
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
3	2					
3	0	2.00	0.00			
3	1	2.00	0.00			
	2.13	2.57	0.00	0.00		

1行目で計算の種類と原子の名前を指定する。ここでは、擬ポテンシャル計算を行う pg を指定する。2行目には Improved Troullier and Martins 型擬ポテンシャルを示す tm2、3行目の原子記号 n にはシリコンを示す Si、計算法の種類 c には非相対論的・スピン無しの Ceperley-Alder 型電子相関関数であることを示す ca を指定する。4行目はこのまま使用する。5行目には主量子数 n 、角運動量子数 l で区別された内殻軌道と価電子軌道の数を入力し、以降の行には価電子軌道の状態を n 、 l 、スピンドウン、スピニアップの順で入力する。最終行で擬ポテンシャルを作るときは s 、 p 、 d 、 f 軌道のカットオフ半径を入力する。なお、この数値は原子単位 a.u. (1a.u. = 0.0529177nm) である。

(4) 計算実行方法

各原子に対する入力データのテンプレートが、\$OSAKA2K/atomscripts0 に与えられている。このディレクトリ内の row2、row3、...サブディレクトリ群に、各周期における原子の入力データが“元素記号.dat”の形で用意されており、この中のシリコン用サンプルデータを用いて、以下の手順で擬ポテンシャルデータを作成する。

- ① \$OSAKA2K/atomscripts0/row3/Si.dat を \$OSAKA2K/patom にコピーする。

```
% cd $OSAKA2K/patom
% cp ../atomscripts0/row3/Si.dat .
```

- ② Si.dat を atom.dat にリネームする。

```
% mv Si.dat atom.dat
```

- ③ 下記の要領で aotm をコンパイルし、実行する。

```
% f77 -w -O atomk.f -o atom
% atom
```

- ④ 作成された擬ポテンシャルデータ pseudo.dat01 と擬波動関数データ fort.13 を、それぞれ si.pot、si.pwf にリネームする。

```
% mv pseudo.dat01 si.pot
% mv fort.13 si.pwf
```

- ⑤ si.pot、si.pwf をポテンシャルデータディレクトリ \$OSAKA2K/ppot/nom にコピーする。このデータは、後述のサンプル計算で使用する。

```
% mv si.* ../ppot/nom
```

(5) 計算結果

波動関数データと擬ポテンシャルデータは、それぞれ fort.13、pseudo.dat01 にバイナリ形式で格納される。fort.10 には r に対するこれらのデータが波動関数 (s 軌道、 p 軌道)、ポテンシャル (s 軌道、 p 軌道) の順にテキスト形式で格納される。この計算時間は2~3秒程度である。

(6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

シリコンの波動関数と擬ポテンシャルの計算結果を以下に示す。図(a)は波動関数、図(b)はポテンシャルを示しており、どちらも実線が s 軌道、破線が p 軌道を示している。このように、atom を用いれば各軌道に対する波動関数、ポテンシャルデータが得られる。なお、ここではテンプレートとして与えられているシリコンの入力データをそのまま使用したが、入力データを自分で作成する際には、予備計算を行って最外殻の極値点を求め、カットオフ半径をその 1.1~1.6 倍程度に取って、再度計算を行う必要がある。

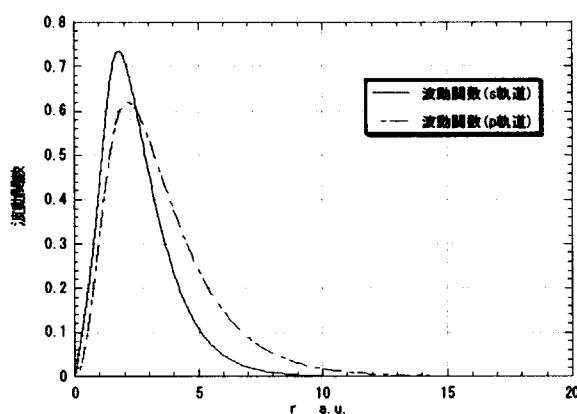


図 3-2(a) シリコンの波動関数

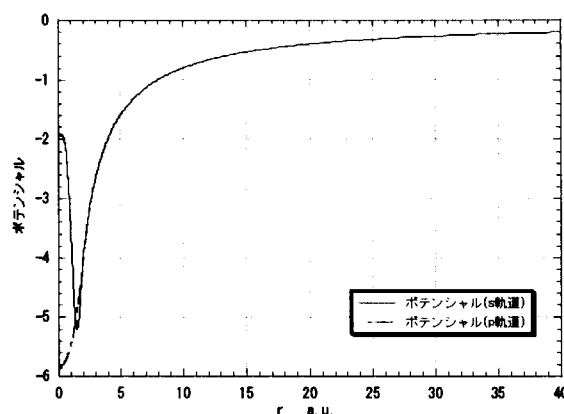


図 3-2(b) シリコンのポテンシャル

3.3. 結晶データの作成

本節では、MSI 社の INSIGHT II フォーマットの結晶データファイル、xtl ファイルを作成する。その後、cryst を用いて xtl ファイルを、空間群を解析しワイクフ座標などを判別したデータ形式である prim 形式に変換する。

(1) サンプル問題の物理的な条件

ここでは、以下の 3 種類の結晶データを用いてシミュレーションを行う。

(a) DOS・バンド計算用結晶：空間群番号 227 (Fd-3m)

基本格子が面心格子であり、001 軸がダイヤモンドグライド面、111 軸が 3 回反軸、110 軸に鏡映面がある。基本原子配置座標は、(0 0 0) の 1 つである。データファイル名は、sidat.xtl である。

(b) 緩和計算（原子位置の最適化計算）用結晶：空間群番号 1 (P1)

単純格子であり、基本原子配置座標は、(0 0 0)、(0 0.5 0.5)、(0.5 0 0.5)、(0.5 0.5 0)、(0.25 0.25 0.25)、(0.75 0.75 0.25)、(0.75 0.25 0.75)、(0.25 0.75 0.75) の 8 つである。データファイル名は、si8.xtl である。

(c) 分子動力学計算用結晶：空間群番号 1 (P1)

単純格子であり、基本原子配置座標は、(0 0 0)、(0.25 0.25 0.25)の2つである。データファイル名は、rhsi.xtlである。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

結晶変換コード `cryst` は、実行時の入力として、変換元データファイルの指定を必要とする。

(3) 入力データ

各サンプル問題に対するデータは、`$OSAKA2K/stdata` の下のサンプルディレクトリに格納されている。ここでは一例として、`si.xtl` を示す。

```
TITLE SI from Solids_Builder 7.0
DIMENSION 3
CELL
  5.43070  5.43070  5.43070  90.00000  90.00000  90.00000
SYMMETRY NUMBER 227 LABEL FD-3M QUALIFIER ORIGIN_1

ATOMS
NAME      X      Y      Z  POT  CHARGE  TEMP  OCCUP  SCAT
SI1      0.00000  0.00000  0.00000  si   4.0000  0.5000  1.0000  SI4+
```

タイトル、次元数のあとにセルパラメータが続く。格子の基本ベクトルの長さ a 、 b 、 c の後に、 bc 、 ca 、 ab の成す角が degree 値で続く。次行に空間群番号が書かれ、その後、各原子の格子に対する相対座標が必要な基本原子分（この例では1つ）続く。

(4) 計算実行方法

計算の実行手順を以下に示す。

- ① `$OSAKA2K/pworks` で `cryst` をコンパイルする。

```
% cd $OSAKA2K/pworks
% f77 -w -O cryst.f TSPACE.F -o cryst
```

- ② サンプル問題を実行するディレクトリを作成する。ここでは、(a)DOS 構造・バンド計算用ディレクトリを `$OSAKA2K/pworks/data/sidat`、(b)緩和計算（原子位置最適化計算）用ディレクトリを `$OSAKA2K/pworks/data/si8dat`、(c)分子動力学計算用ディレクトリを `$OSAKA2K/pworks/data/rhsidat` とする。以下、`sidat` での処理について示す。

```
% cd $OSAKA2K/pworks/data
% mkdir sidat
% mkdir si8dat
% mkdir rhsidat
```

- ③ `$OSAKA2K/pworks/pwdat` 内のファイルを各ディレクトリにコピーし、以下の要領で `prep` を実行可能にする。

```
% cd sidat
% cp $OSAKA2K/pworks/pwdat/* .
% chmod +x prep
```

- ④ `prep` を実行し、各ディレクトリにリンクを作成する。

```
% prep
```

- ⑤ すでに述べた要領で結晶データファイルを作成する。

- ⑥ 各ディレクトリで `cryst` を実行する。実行時に結晶データファイル名を聞いてくるので、ファイル名から `xtl` を除いた名前、`si.` を入力する（最後に `.` を忘れないよう注意する）。

```
% cryst
```

```
input the crystal name with a period at the end
si.
```

(5) 計算結果

cryst の実行により、prim ファイルが作成される。この計算は数秒で終了する。なお、各サンプル問題に対してすでに計算された prim ファイルが、\$OSAKA2K/stddata の下のサンプルディレクトリに格納されている。

(6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

作成した prim ファイルの一例として、si.prim を以下に示す。

```
TITLE SI from Solids_Builder 7.0
      date:   Sat Aug 31 12:19:08 2002
DIMENSION 3
LATTICE PARAMETERS (A, B, C, CA, CB, CC) in a.u.
  10.2625349 10.2625349 10.2625349
   .0000000   .0000000   .0000000
Space group
  227 Oh7 Fd-3m ORIGIN_1
IL   NG   NC
  2   48   1
The conventional vectors
  10.2625349 .0000000 .0000000
   .0000000 10.2625349 .0000000
   .0000000 .0000000 10.2625349
The primitive vectors
   .0000000 5.1312675 5.1312675
  5.1312675 .0000000 5.1312675
  5.1312675 5.1312675 .0000000
The primitive reciprocal vectors without 2Pi
  -.0974418 .0974418 .0974418
   .0974418 -.0974418 .0974418
   .0974418 .0974418 -.0974418
VUNCL (ab3) = 270.211577647002173 1080.84631058800869
UNIT of G space = 0.612244962124681935

KIND OF ATOMS
  1
Wycoff Positions
ATM ( x, y, z) Nos Wycf Code
  1 ( .00000, .00000, .00000) 1/1 8a 0 0/1 0 0/1 0 0/1
NUMBER OF ATOMS
  2
L. L. AND U. U. VALENCE ELEMENT
  1 2 4.0000 1 si
POSITIONS RELATIVE TO A UNIT CONVENTIONAL CELL
  1 .0000000 .0000000 .0000000 1 si 1
  2 .2500000 .2500000 .2500000 1 si 13
KION (the last index of k-th kind element)
  2
IAA (the kind index of all the atoms)
  1 1
```

前半部は、conventional vectors (慣用単位格子) や primitive vectors (基本単位格子) で標記した格子パラメータが出力されている。また、後半部では原子の種類やワイコフ座標、対称操作後の原子の座標など、点群のデータが出力されている。

3.4. 電化分布密度計算

pwm を用いれば、セルフコンシステントな電荷密度分布や全エネルギーを求めることができる。

そのためには、各サンプル問題の計算規模に合わせた配列長を求め、それらを `pwm.inc` に記述しなければならない。本節では、これらの計算の実行方法について述べる。

(1) サンプル問題の物理的な条件

`pwm` の計算にはステップ数やエネルギー変化、波動関数変化の許容量など、解析対象に則した収束条件を設定する必要がある。ここでは、エネルギー変化の許容値を 1.0×10^{-12} Ry/cell、波動関数変化の許容値を 1.0×10^{-11} Ry²/cell とした。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

`pwm` には、サンプル問題にあった配列長を `pwm.inc` に書き込む形で与える。この配列長は、`inip` によって得られる。具体的な `pwm.inc` の調整方法については、次節以降に述べる。

(3) 入力データ

配列長計算コード `inip` のパラメータファイルの一例を以下に示す。

```

Input file name (priod is needed at the end)
si.
Parameters about k points
Cutoff k radius (AMAX) given by lattice index without 2Pi
3.1
way to give sampling points (0:given manually, 1:calc)
1
number of segmentation (NKDIV)
2
Real-space cut off AM in relative units'
8.1
number of electrons per cell (NEPC)
8
need initial WFs? (needWFs =1 if needed, needWFs =0 if not)
0
potential type (spin, NLCC, relativistic)
0      0      0
cutoff parameter in Ewald sum (ALPHA) in the unit of the bond length
1.0
  
```

まず、計算しようとする結晶データのファイル名が`si.`まで書かれる。その後、平面波のカットオフ、 k サンプルング点の与え方の自動・手動切り替えフラグ、サンプルング点の分割数、実空間格子のカットオフ半径、基本単位格子中の電子数、初期波動関数を与えるか否かのフラグ、ポテンシャル補正、Ewald 和を取るときのカットオフパラメータの順で指定する。`inip` の実行方法については後述する。

実行後に得られた `inip_*.out` (`*`は各結晶データファイルの名前から`.prim`を除いたもの)の最後の部分に `pwm` で必要な配列長が出力されるので、それをもとに `pwm.inc` 内の `NHDIM`、`NGDIM`、`NEDIM`、`NKDIM` (`NKDIM` には `inip_*.out` の `NKPTS` を受け渡す) を設定する。また、`pwm` の計算ステップ数や収束条件の書かれた `pwm.para` の一例を以下に示す。

```

Input file name
si.prim
time step (TMDL) in Ry sec
2
number of iteration for electrons (NITEL)
15
control of diagonalization (IDGN)
  
```

```

1
atomic movement 1:Phonon Calc, 2: Ion Relax (IonMove)
0
number of iteration for atoms (IHF)
4
npath  nstep
5 1
wftol   ftol
1.0D-11 8.0D-5
etol
1.0D-12
iread   iusran
0 1
iprecg
1
imoni, irhout, iwfout
0 1 1
resume of ion movement (IonResume)
0
iMetal (Yes=1)
0 0

the followings are optional
Cell relaxation (Active: iCellMove=1)
0
iterCell
2
iCellCnstr '0: tricl, 1: monocl, 2: orthor, 3: tetra, 4: cubic'
4
Applied pressure (GPa)
0.0

```

はじめに、結晶ファイル名、時間ステップ数（ここでは未使用）、収束パラメータを指定する。npath はある一つのバンドに対し共役勾配過程を繰り返す数で、それを全体に対して NITEL 回繰り返す。nstep は未使用なので1としておく。その後、エネルギー変化許容値 etol や波動関数変化の許容値 wftol が続く。IonMove は、ここでは電荷分布のセルフコンシステント解を求めるのみなので0（原子固定）とする。iread は継続計算であるか否かのパラメータで、imoni の行にあるパラメータは出力制御を示す。iMetal で金属か非金属かを示し、iCellMove で最適化パラメータを指定する。

(4) 計算実行方法

pwm 実行までの手順を以下に示す。ただし、数値計算ライブラリ LAPACK のインストールが済んでいるものとする。また、前節で述べた cryst がすでに実行済みであるものとする。

- ① \$OSAKA2K/pworks/drivs.f の 16、18 行目に、OSAKA-2000 インストールディレクトリを指定する。
- ② \$OSAKA2K/pworks において make inip コマンドで inip をコンパイルし、\$OSAKA2K/pworks/data/sidat などのデータディレクトリに移動して、inip を実行する。

```

% cd $OSAKA2K/pworks
% make inip
% cd data/sidat
% inip

```

- ③ inip_*.out（"*"は各結晶データファイルの名前から".prim"を除いたもの）を元に pwm.inc を編集し、make コマンドで pwm をコンパイルする。

```

% make

```

- ④ pwm.para を設定した後、pwm を実行する。

```
% pwm
```

- (5) 計算結果

inip の実行は数秒で終了する。これにより、pwm で必要な配列長などが記述された inip_*.out の他、サンプリング点とその総数を記述した inip_*.inp、それぞれの点の全平面波データ inip_*.kpt、実空間の対称点に関するデータを記述した inip_*.rmesh などが生成される。

一例として inip_si.out の最後尾の部分を以下に示す。

Passed parameters			
	NEPC	8	NEDIM 4
	NKPTS	2	NHDIM 169
	NGDIM	8	
Then, ...			
LIN SEG	NGLIN	17	NADIM 16
VOL SEG	NG3	4913	NA3 4096

これより編集した、pwm.inc の一部を以下に示す。

```
INCLUDE 'TSPARAM'
PARAMETER (LMAX=1,           !max of angular momentum
&      NANDIM=1,           !n of elements
&      KADIM=1,           !n of kinds of atoms
&      NPDIM=2,           !n of atoms in a cell
&      MSDIM=1200,        !n of mesh points
&      NEDIM=4,           !The n of energy levels = half of elec.
&      NKDIM=2,           !n of k points
&      NHDIM=169,         !The n of plane waves
&      NGDIM=8,           !Max of G-G'
&      NRLIM=10,          !n in real lattice sum
&      NLRDIM=(2*NRLIM+1)**3,
&      NLKDIM=(2*NGDIM+1)**3,
&      NADIM=NGDIM*2,
&      NG3=(2*NGDIM+1)**3,
&      NA3=NADIM**3)
PARAMETER (LLMAX=4)
```

pwm の実行により、以下の出力ファイル群が得られる。

```
pwm_*.eks : KS エネルギーレベル
pwm_*.etot: 全エネルギー変化等
pwm_*.frc : Hellman Feynman 力
pwm_*.out : 計算経過
pwm_*.rho : 電荷密度分布
pwm_*.sum : 計算結果の要約
pwm_*.wfn : 波動関数 (バイナリーファイル)
```

この計算はサンプルの種類により短いもので数分、長いものは数時間かかる。

- (6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

出力ファイルの中で最も重要なのは pwm_*.etot である。このファイルの前半にはシミュレーション条件が記入され、後半部分 ("=== Main Calculation ==="以降)には電子系の収束過程や全エネルギーの内訳、ストレスなどが出力される。

エネルギーの収束過程を以下に示す。エネルギー変動と波動関数誤差がステップとともに減少していき、6ステップ目で設定した許容値の範囲に入りプログラムが停止している。

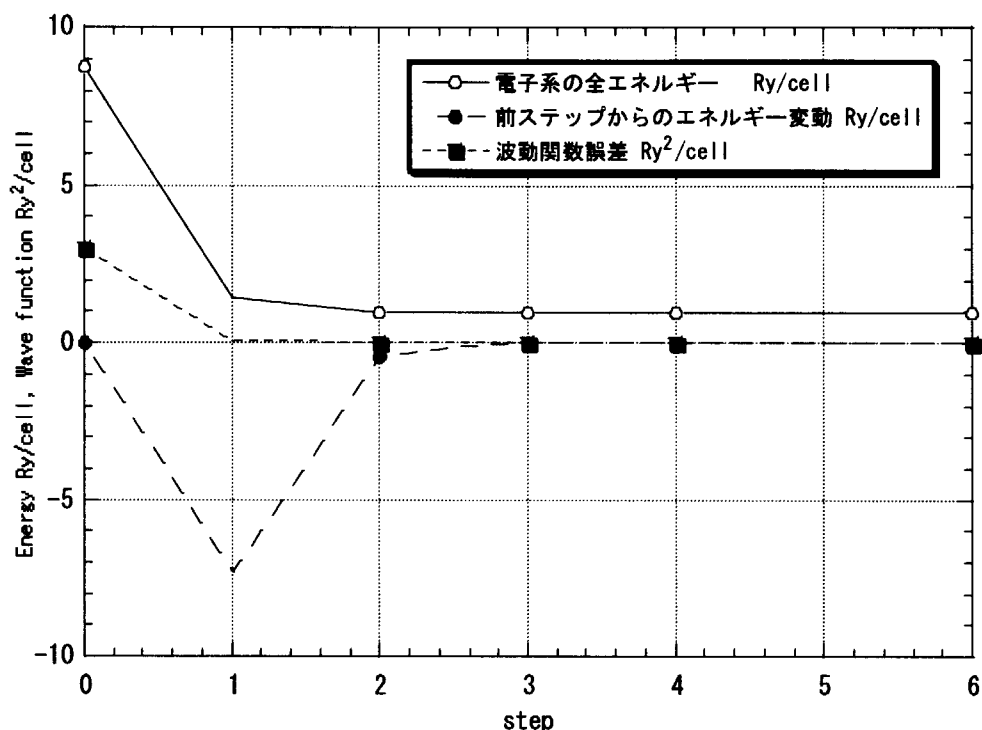


図 3-3 電子系のエネルギー、エネルギー変動、波動関数誤差の時間推移

3.5. DOS 構造計算

doscl を用いれば、前節の pwm で出力された電荷密度分布 `pwm*.rho` より、電子の DOS を計算することができる。本節では、この方法について述べる。

(1) サンプル問題の物理的な条件

3.3 節にサンプル問題で使用する 3 種類の結晶を示したが、ここでは(a)の DOS・バンド計算用結晶について解析する。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

`doscl.f` は、配列長などの設定用インクルードファイル `dos.inc` をコンパイル時に読み込む。基本的には `pwm.inc` と同様であるが、以下のパラメータが追加されている。

NKLMAX: k 空間の一次元のメッシュ数の上限
 NBDIM : バンド数の上限
 ERESO : Ry 単位での縮退の基準値

ここでは、NKLMAX、NBDIM、ERESO をそれぞれ 16、50、1.0D-2 に設定する。

(3) 入力データ

入力パラメータファイルは、`dos.para` より与える。その一例を以下に示す。

Input file name
`si.prim`
 number of division (nkdiv)

```

8
number of levels you want to draw (NBUP) usually NEPC
8
control (ncontl)
1
scan zone only (iscan)
1
print control (ilp)
1
use symmetry (isymm)
1
energy unit (ienun=0 for Ry, 1 for eV)
0
the next parameters if any

```

結晶ファイル名、k 空間メッシュ数、バンドの数を指定する。最後の部分で出力エネルギーの単位を選択する。他のパラメータはデバッグ用なので、このまま使用する。

(4) 計算実行方法

前節までの計算が終了しているものとする。

- ① \$OSAKA2K/pworks/bandWK より、“dos”が含まれるファイルと kpset.f をディレクトリ \$OSAKA2K/pworks/data/sidat にコピーする。

```

% cd $OSAKA2K/pworks/data/sidat
% cp $OSAKA2K/pworks/bandWK/*dos* .
% cp $OSAKA2K/pworks/bandWK/kpset.f .

```

- ② (2)、(3)に従い、pwm.inc を元に dos.inc や入力パラメータファイル dos.para を編集する。
 ③ make doscl コマンドで doscl をコンパイルし、実行する。

```

% make doscl
% doscl

```

- ④ 以下の要領で pdos をコンパイルし、実行する。実行時に結晶ファイル名を聞いてくるので、“si.”と入力する。

```

% f77 pdosdr.f kpset.f TSPACE.F -o pdos -w
% pdos
input the crystal name with a period at the end
si.

```

(5) 計算結果

doscl の実行は 1 分弱で終了し、線スペクトルの出力ファイルとして dos_*.tbl と fort.2 が得られる。

(6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

tetrahedron 法により滑らかにしたシリコンの DOS 値を以下に示している。白丸は DOS 値を、黒丸は各エネルギーレベルまでの DOS 値の積分値を示している。電子数は 8 であるため、状態数の積分値は 16 となっている。また、存在確率が 1/2 になるエネルギー、すなわちフェルミエネルギーは約 0.456Ry である。

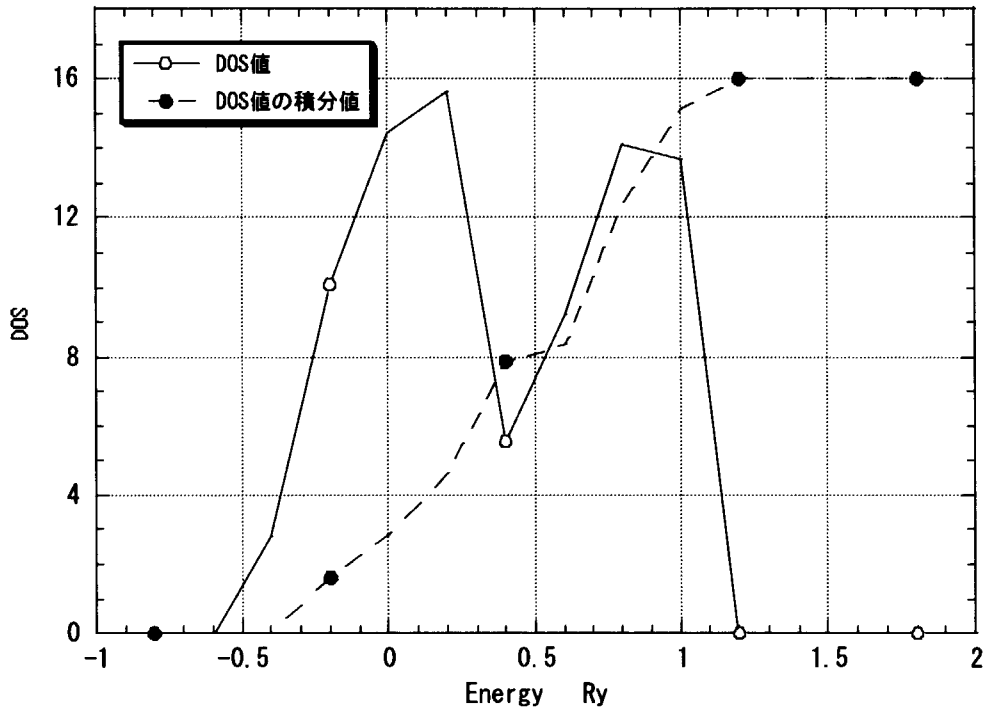


図 3-4 シリコンの DOS

3.6. バンド構造計算

band を用いれば、3.4 節の pwm で出力された電荷密度分布 pwm_*.rho より、電子のバンドを計算することができる。pwm は指定された k 空間上の線（多くは対称線）に沿って、バンドを計算する。本節では、この方法について述べる。

(1) サンプル問題の物理的な条件

前節と同様に、3.3 節の (a)DOS・バンド計算用結晶について計算する。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

band.f は、配列長などの設定用インクルードファイル band.inc をコンパイル時に読み込む。基本的には pwm.inc と同様であるが、以下のパラメータが追加されている。

NKDIM : 描く対称線の本数+1 に取る
 kptmax: 全 k 点数の上限
 NBDIM : 描きたいバンドの数の上限

ここでは、NKDIM、kptmax、NBDIM をそれぞれ 10、100、16 に設定する。

(3) 入力データ

入力パラメータファイルは、band.para より与える。その一例を以下に示す。

Input file name
 si.prim
 number of k points specifying symmetry lines (NKPTS)

```

7
KB(3), ICB (in prim)
0 0 0 1 G
3 3 6 8 K
1 1 2 2 X
1 2 3 4 W
1 1 1 2 L
0 0 0 1 G
0 1 1 2 X
number of division per line (NDIV)
5
number of levels you want to draw (NBUP) usually NEPC
8
control (ncontl)
1
scan zone only (iscan)
1
print control (ilp)
1
use symmetry (isymm)
1
the next parameters if any

```

結晶ファイル名、描きたい線の端と折れ目の k 点を指定する。また、これらの節目の k 点数を NKPTS に指定する。次の NDIV には、各線の分割数を指定する。ただし、 $NKDIM * NDIV \leq kptmax$ でなければならない。NBUP には書きたいバンドの数を指定する。この値は単位格子あたりの電子数程度で良いが、1、2 程度の時は少し大きめに取る。他のパラメータはデバッグ用なので、このまま使用する。

バンドを補完し PostScript 形式で出力する ayband の入力ファイルとして、fort.3 が必要である。fort.3 の一例を以下に示す。

```

NONMSPIN-ORBIT
0 0 50          NLCOMP NSPIN IFILE
1 1 12         JPR   JMARK IPOINT(character)
-0.5 1.2 100.0 130.0 EMIN EMAX YM XM
6
0 0 0 8 6 6 0 8 SM
6 6 0 8 8 8 0 8 S
8 8 0 8 8 4 0 8 Z
8 4 0 8 4 4 4 8 Q
4 4 4 8 0 0 0 8 LD
0 0 0 8 8 0 0 8 DT
0.4623        Fermi lev
Si PseudoPotential

```

1 行目は磁性状態 (pwm では NONMSPIN-ORBIT のみ有効) で、2 行目は左から、角運動量による成分分解の数、スピン状態、ファイルの出力番号で、前の 2 つは 0 にする。3 行目の最初の 2 つは出力制御パラメータで、3 番目はラベルの文字の大きさを指定する。4 行目はプロット時のエネルギー最小値、最大値、y 軸、x 軸スケール (mm 単位) で、5 行目は次に描こうとする k 空間上の線の数で、それ以降の行が線の端点である。最後の 2 行にはフェルミレベルとタイトルを指定する。

(4) 計算実行方法

これまで同様、3.4 節までの計算が終了しているものとする。また、カレントディレクトリは、\$OSAKA2K/pworks/data/sidat とする。

- ① \$OSAKA2K/pworks/bandWK より、“band”が含まれるファイルと ayplot.f および fort.3 をディレクトリ \$OSAKA2K/pworks/data/sidat にコピーする。

```
% cd $OSAKA/pworks/data/sidat
% cp $OSAKA2K/pworks/bandWK/*band* .
% cp $OSAKA2K/pworks/bandWK/ayplot.f .
% cp $OSAKA2K/pworks/bandWK/fort.3 .
```

- ② (2)、(3)に従い、pwm.inc を元に band.inc や入力パラメータファイル band.para を編集する。
- ③ Makefile の 24 行目を、“TARGET3=doscl”から“TARGET3=band”に修正する。
- ④ make band コマンドで band をコンパイルし、実行する。

```
% make band
% band
```

- ⑤ (3)に従い、入力ファイル fort.3 を作成する。その後、以下の要領で ayband をコンパイルし、実行する。この際、実行時に結晶ファイル名を聞いてくるので、“si.”と入力する。

```
% f77 ayband.f ayplot.f TSPACE.F -o ayband -w
% ayband
input the crystal name with a period at the end
si.
```

(5) 計算結果

band の実行は数 10 秒で、ayband は数秒で終了する。band の実行結果として band_si.tbl が出力され、さらに ayband の実行結果として PostScript 形式の fort.50 が出力される。

(6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

以下の図(a)は、band により出力されたシリコンのバンド構造ファイル band_si.tbl をプロットしたものであり、図(b)は band の計算結果を元に、ayband により作成したポストスクリプトファイルを表示したものである。横軸が k 点番号を示しており、図(a)では k 点の間隔が等間隔になっているのに対し、図(b)では k 点間の長さが正しく与えられている。また、縦軸がその k 点上のエネルギーをあらわしている。図(a)では各 k 点に対するバンドエネルギーが列挙されているため、プロットするときに点間を自動で結ぶことができない。特にバンドが密集しているところでは、手作業でも困難である。一方、ayband ではバンドの対称性などを考慮することでバンドを線として結び、スプライン曲線で滑らかに表示している。

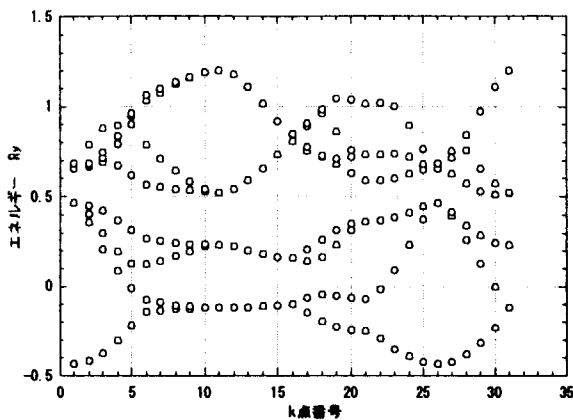


図 3-5(a) band によるバンド図

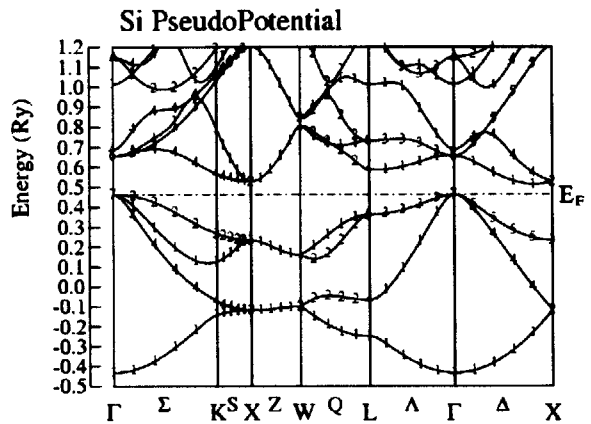


図 3-5(b) ayband によるバンド図

3.7. 原子位置の最適化

3.4節では、pwmによる原子位置を固定した場合のセルフコンシステントな電荷密度分布等の計算法について述べた。本節では、pwmを用いて原子位置を固定せずに原子位置を最適化する計算について述べる。

(1) サンプル問題の物理的な条件

3.3節で作成した、(b)緩和計算（原子位置の最適化計算）用結晶について計算する。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

pwmのコンパイルにはpwm.incが必要である。pwm.incの設定については、3.4節ですでに述べているので省略する。なお、3.3節で作成した結晶データsi8.primでは、各原子が比較的安定な位置に配置されており、このまま計算しても原子の移動の様子があまり見られない。そこで、si8.prim内の原子の1つを少しずらしておく。

(3) 入力データ

pwmの入力パラメータはpwm.paraに記述する。pwm.paraは、緩和過程の計算においても基本的には3.4節で説明した通りであるが、何点か修正を加える必要がある。以下に、pwm.paraの修正点を示す。

```
atomic movement 1:Phonon Calc, 2: Ion Relax (IonMove)
2
iread iusran
1 1
```

3.4節では原子を固定していたため、IonMoveを0に設定していたが、ここでは2とする。また、3.4節で作成した波動関数を利用するため、ireadを1にして継続計算を行うよう設定する。この波動関数データはpwm_si8.wfnより得る。また、si8.primについては、以下のように原子を1つ少しだけずらしておく。

POSITIONS RELATIVE TO A UNIT CONVENTIONAL CELL				TYPE	SYM(IG)
1	.000000	.000000	.000000	1 si	1
2	.000000	.500000	.500000	1 si	1
3	.500000	.000000	.500000	1 si	1
4	.500000	.500000	.000000	1 si	1
5	.260000	.270000	.240000	1 si	1
6	.750000	.750000	.250000	1 si	1
7	.750000	.250000	.750000	1 si	1
8	.250000	.750000	.750000	1 si	1

(4) 計算実行方法

3.4 節のセルフコンシステントな電子密度分布の計算が終了しているものとする。

- ① 3.4 節で作成した波動関数データ `pwm_si8.wfn` を `inip_si8.wfn` にリネームする。

```
% mv pwm_si8.wfn inip_si8.wfn
```

- ② `pwm` を実行する。

```
% pwm
```

(5) 計算結果

出力として得られるデータは、3.4 節で述べたとおりである。なお、このサンプル問題に対するシミュレーションでは、10 時間以上の計算時間が必要である。

(6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

最適化前後の原子配置 (yz 面) を、以下に示す。図は、縦軸に z 座標を横軸に y 座標を取っている。シミュレーション前に、5 番の原子 (点線の交差する近辺にある原子) を少しずらしておいたが、シミュレーション後には格子上的位置に戻っている。これより、原子配置の最適化計算は正しく行われたと考えられる。

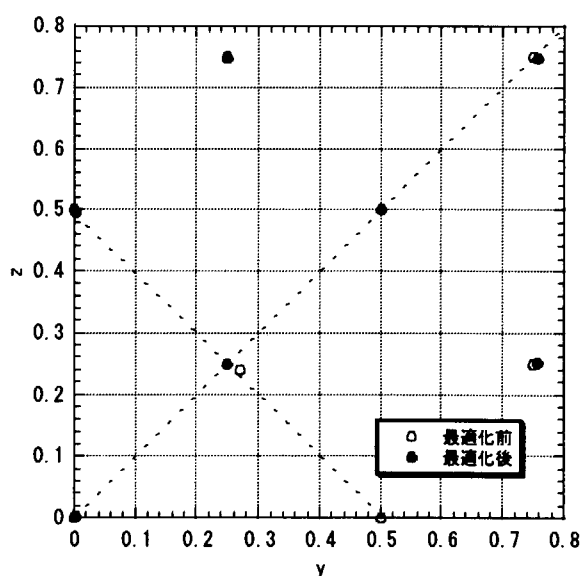


図 3-6 最適化前後の原子位置

3.8. 分子動力学計算

mds を用いると分子動力学計算が行える。本節では、この方法について述べる。

(1) サンプル問題の物理的な条件

ここでは、3.3 節で作成した(c)分子動力学計算用結晶について計算する。

(2) 計算プログラムに対する入力条件

mds には、インクルードファイルとして mds. inc が必要である。これまで同様、mds. inc は基本的に pwm. inc と同じであるが、パラメータとして以下のものが追加されている。

```
C special for mds
PARAMETER (RPBE=911.4216273D0)
PARAMETER (FKtoRy=6.336088508D-6)
PARAMETER (RySec=2.0D0*2.418911D-5)           !Rytime->psec
```

(3) 入力データ

波動関数データとして 3.4 節で作成した pwm_rhsi.wfn を使用する。また、パラメータファイルとして mds. para を設定する。その一例を以下に示す。

```
Input file name
rhsi.prim
resume of ion movement (IonResume)
0
number of iteration for electrons (NIT)
5
control of diagonalization (IDGN)
1
time step (TMDL) in Ry sec
100.
number of iterations for atom move (IterMax)
20
Ion Temperature (TMPA) in K (valid only for ivcond=1)
300.
initial velocity (ivcond=0:zero, 1:random, 2:given) (ignored in case IonResume=1)
1
npath  nstep
5      1
wftol  ftol
1.0D-11 8.0D-5
etol
1.0D-12
iread  iusran
1      1
iprecg
1
imoni, irhout, iwfout
0      1      1
iMetal (Yes=1)
0      0
Temperature program (1: ON, 0: OFF)
0
keep period (itkeep), Tstart, Tend, itend
5, 300.0, 150.0, 45

the followings are optional
Cell relaxation (Active: iCellMove=1)
0
iterCell
3
iCellCnstr '0: tricl, 1: monocl, 2: orth, 3: tetra, 4: cubic'
```



```
4
Applied pressure (GPa)
0.0
```

このファイルで指定するパラメータは `pwm. para` と重複するものもあり、ここでは、`mds` 特有のもののみ説明する。`NIT` は原子の移動ごとに行われる電子系の共役勾配法の繰り返し回数である。`TMDL` は時間ステップで、`Ry·sec` 単位で与える。`IterMax` は原子の全移動ステップ数である。原子の初期速度の与え方は `ivcond` で指定し、ランダム (`ivcond=1`) の場合、その平均温度を `TMPA` で指定する。

一度行った MD 計算をさらに継続して行う場合、計算出力の `mds_rhsi. wfn` を `pwm_rhsi. wfn` とリネームし、`mds. para` 内の `IonResume` を 1 にして再実行する。このとき、原子の位置や速度は `mds_rhsi. vrs` から読み込まれ、`ivcond` 等の値は無視される。

(4) 計算実行方法

これまで同様、3.4 節までの計算が終了しているものとする。また、カレントディレクトリは `$OSAKA2K/pworks/data/rhsidat` とする。

- ① 分子動力学計算用ディレクトリとして、`mdcal` を作成し、移動する。

```
% mkdir mdcal
% cd mdcal
```

- ② `$OSAKA2K/pworks/mdsWK/mprep` を用いて、分子動力学計算用コード群にリンクを作成する。

```
% cp $OSAKA2K/pworks/mdsWK/mprep .
% chmod +x mprep
% mprep
```

`mds` コード群と `pwm` コード群は同じ名前のファイルを使用しており、`$OSAKA2K/pworks/data/rhsidat` で `mprep` を実行しても、`mds` コード群のすべてを持ってくることはできない。リンクを作成できなかったファイルは、ファイル名が同じでも中身が異なるため、コンパイル・実行はできない。リンクを解除した後、`mprep` を実行し、このディレクトリで分子動力学計算を行うこともできるが、ここでは別ディレクトリで計算を行う。リンクを解除せずに `$OSAKA2K/pworks/mdsWK` のファイルを上書きコピーすると `$OSAKA2K/pworks` にあるソースファイル群に上書きされてしまうので、必ず `mprep` を使用すること。

- ③ 3.4 節までに計算したデータを、`$OSAKA2K/pworks/data/rhsidat` よりコピーしてくる。また、`TSPACE` 関連のファイルもコピーする。

```
% cp ../inip_rhsi.* .
% cp ../pwm_rhsi. wfn .
% cp ../TSPACE.F .
% cp ../TSPARAM .
% cp ../rhsi. prim .
```

- ④ (2)、(3)に従い、`mds. inc`、`mds. para` を編集する。

- ⑤ `make` コマンドで `mds` をコンパイルし、実行する。

```
% make mds
% mds
```

(5) 計算結果 (計算時間を含む)

このサンプル問題の場合、計算は数 10 分で終了する。計算の結果、以下のファイルが出力される。

mds_*.atps:	各ステップの原子位置
mds_*.eks:	KS エネルギーレベル
mds_*.etot:	全エネルギー変化等
mds_*.frc:	Hellman Feynman 力
mds_*.out:	計算経過
mds_*.rho:	電荷密度分布
mds_*.sum:	計算結果の要約
mds_*.vel:	各ステップの原子速度
mds_*.vrs:	原子の最終位置・速度
mds_*.wfn:	波動関数ファイル

(6) 計算結果の物理的な意味のまとめ

以下の図は、原子 1 の y - z 座標の時間推移をグラフ化したものである。原子は円を描くように移動しており、熱振動していることが分かる。

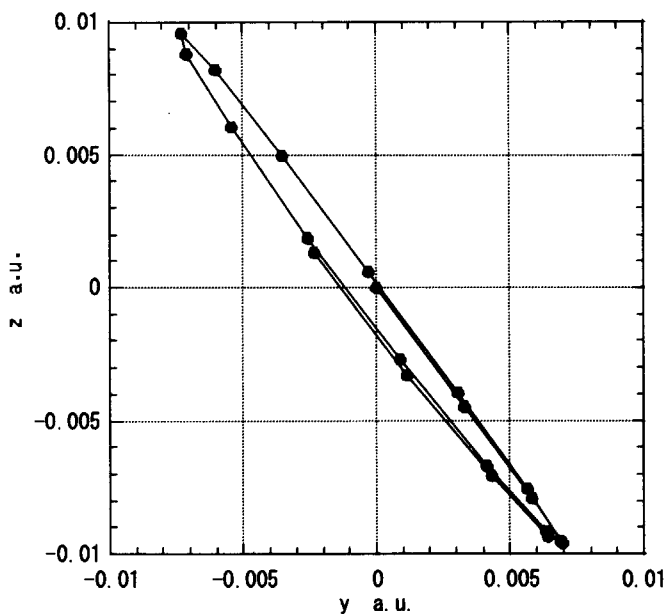


図 3-7 原子位置の時間推移

また、次の図は系のエネルギーの時間推移を示しており、図(a)は系の全原子の運動エネルギーを、図(b)は系のポテンシャルエネルギーを示している。これから判るとおり、両エネルギーとも時間と共に振動しており、その振動波形は反転している。これより、系内の全エネルギーはおおよそ一定となり、エネルギー保存則が成り立っていることが分かる。

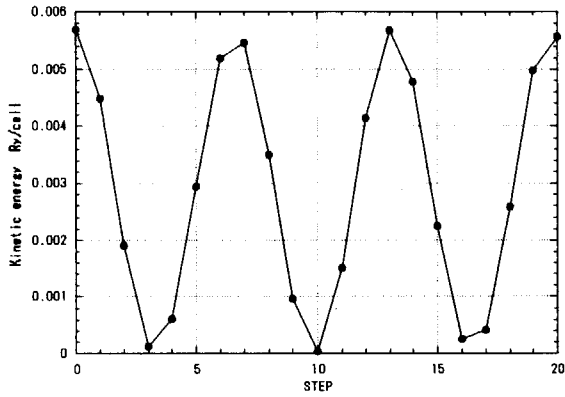


図 3-8(a) 運動エネルギーの時間変化

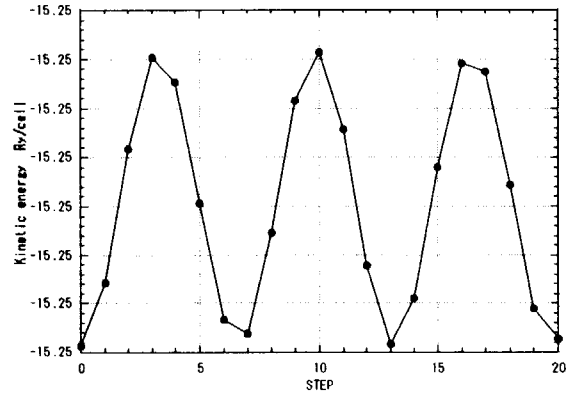


図 3-8(b) 結晶エネルギーの時間変化

4. GUI 環境整備の検討

4.1. XBAND の調査

XBAND は、電子状態計算を行う際の結晶のモデリングや、シミュレーションエンジン用の入力ファイル作成を GUI 環境で行うためのフリーソフトウェア (GPL 準拠) である。本節では、このソフトウェアの特徴や有用性について述べる。

(1) XBAND の特徴

XBAND は、独ミュンヘン大学の Hubert Ebert 氏を中心に、同氏らの SPR-KKR コード用に開発されている結晶モデリングツールであるが、他の電子状態計算プログラムの入力データ作成用にカスタマイズすることが可能である。通常、結晶の構造は空間群を用いて表記するが、回転・鏡映などの空間操作パターンや点群などの作成は、マニュアル入力では大変な手間がかかる。

また、結晶描画ツールやデータベース等から結晶データを入手した場合でも、使用するエンジン用のフォーマットに編集し直さなければならない。XBAND は、結晶構造データを作成する部分とエンジン用フォーマットデータを作成する部分が分離できているため、後者をカスタマイズすることで結晶作成からエンジン用入力データ作成までを効率よく行うことができる。また、Tcl 言語をベースに記述されているため、このカスタマイズ作業も比較的容易に行うことができる。Tcl/tk 環境がある UNIX マシンであればインストールも非常に簡単で、Ebert 氏の WEB サイト <http://olymp.phys.chemie.uni-muenchen.de/ak/ebert/xband.html> でユーザ登録を行い、e-mail で送られて来るアーカイブを展開して XBAND から呼び出される一部の Fortran ユーティリティ (findsym、plot、spheres) を必要に応じて make すればよい。

(2) XBAND による可視化処理

作成した結晶を確認する場合、XBAND 上から RasMol を起動して可視化表示することができる。ただし、RasMol は別途 <http://www.bernstein-plus-sons.com/software/rasmol> よりダウンロードが必要である。RasMol は核酸などの高分子も高速で表示可能な分子グラフィックスプログラムであり、原子の座標やその接続情報などを可視化表示して、PostScript、GIF、BMP など多様な画像形式で保存できる。また、マウスにより 3 次元的な回転、並進、ズームなどの操作を行うことができる。

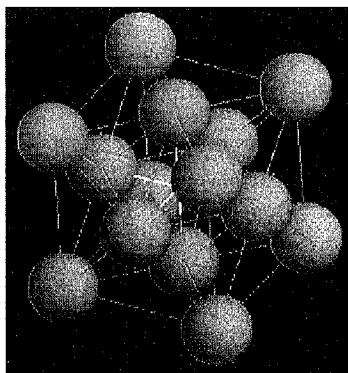


図 4-1 XBAND で作成し、Rasmol で可視化した Cu 結晶

上記の図は、XBAND で作成した FCC 構造の Cu 結晶を RasMol で表示した結果の一例である。空間操作を行った後のもので、格子の頂点と面心位置に原子が配置されているのが分かる。

(3) 電子状態計算用 GUI としての有用性

電子状態計算では、KKR 法や LAPW 法、擬ポテンシャル法など様々な物理モデルが提唱され、計算速度や計算規模、信頼性などで、それぞれに長所・短所がある。XBAND を使用すれば、作成した 1 つの結晶構造ファイルを各エンジン用入力ファイルに変換できるので、複数の物理モデルで同一条件の計算を行い、比較・検証することができる。これは理論解析を行う者にとって非常に有用であり、エンジンの入力用結晶データ作成ツールとして、XBAND は高い性能を持っていると言える。

4.2. MACHIKANEYAMA-2000、OSAKA-2000 の現状調査

MACHIKANEYAMA-2000、OSAKA-2000 については、2 章および 3 章でその実行手順を詳細に述べているが、本節では、パラメータの設定やデータの可視化といった、ユーザインターフェース部分に重点を置き、シミュレーションの流れを説明する。

(1) MACHIKANEYAMA-2000 のシミュレーションの流れ

MACHIKANEYAMA-2000 では、解析対象の規模に合わせて配列要素の大きさを決め、実行ファイルを作成する。プログラムの実行は、実行モジュール specx にインプットファイルをリダイレクトで読み込ませることで行い、計算結果が標準出力に書き出される。インプットファイルの作成は、前節の XBAND を用いることで、すでに GUI 化されている。しかし DOS 構造のグラフ化など、結果の可視化処理は、出力ファイルを MACHIKANEYAMA-2000 のパッケージに付属の awk スクリプトで処理した後、gnuplot で行う。このとき、出力ファイルのフォーマットから、gnuplot をバッチモードで起動するために必要なコマンドファイルを作成しておかなければならない。

以下に、MACHIKANEYAMA-2000 の処理の流れを示す。

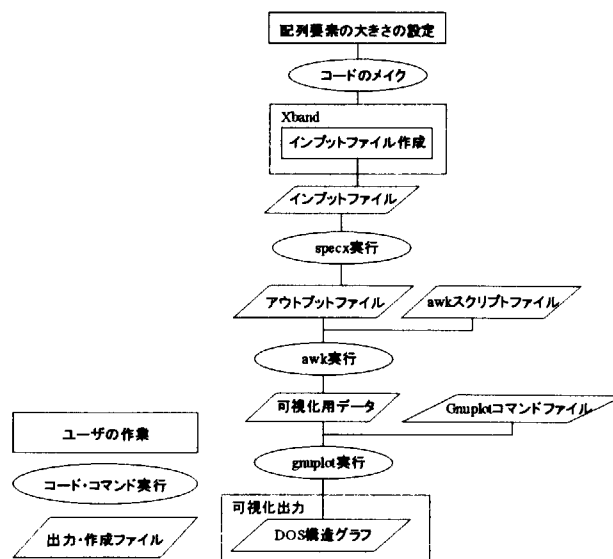


図 4-2 MACHIKANEYAMA-2000 の処理フロー

(2) OSAKA-2000 のシミュレーションの流れ

OSAKA-2000 では、セルフコンシステントな電荷分布の計算を行い、そこで出力される電子分布データをもとに、DOS 構造やバンド計算、MD 計算などを行うことができる。多様な材料に対し、高度なシミュレーションを行える半面、汎用性を維持するために複雑な操作が必要である。

必要なデータ処理やコンパイル・実行などの操作はすべて、コマンドベースで行われる。各ディレクトリにあるパラメータファイルも、ユーザは vi 等のエディタを用いて、数字の桁数やデータ間の空白の数まで決められた書式にあわせて記述しなければならない。また、OSAKA-2000 の WEB サイトに、各フェーズで出力されるデータに可視化処理を施すための科学技術計算用数式処理ソフト Mathematica のノートブックが多数提供されている。しかし、これらを利用するためには、Mathematica のインストールされた PC にデータを転送し、処理する必要がある。

このように、ユーザが OSAKA-2000 の機能をフルに活用するためには、物理学的知識はもちろんのこと、各処理を行うためのある程度の UNIX の知識や各種パラメータのフォーマット、コード群の実行手順、それらのコード間のデータ受け渡し方法等、コードの取り扱いに関する多くの知識を必要とする。そのため、OSAKA-2000 の WEB サイト上では、上下巻合わせて 150 ページを超える詳細なマニュアルが提供されている。

以下の図は、OSAKA-2000 を用いて、各種計算を行う前段階とも言えるセルフコンシステントな電荷分布の計算を行うまでの処理の流れである。

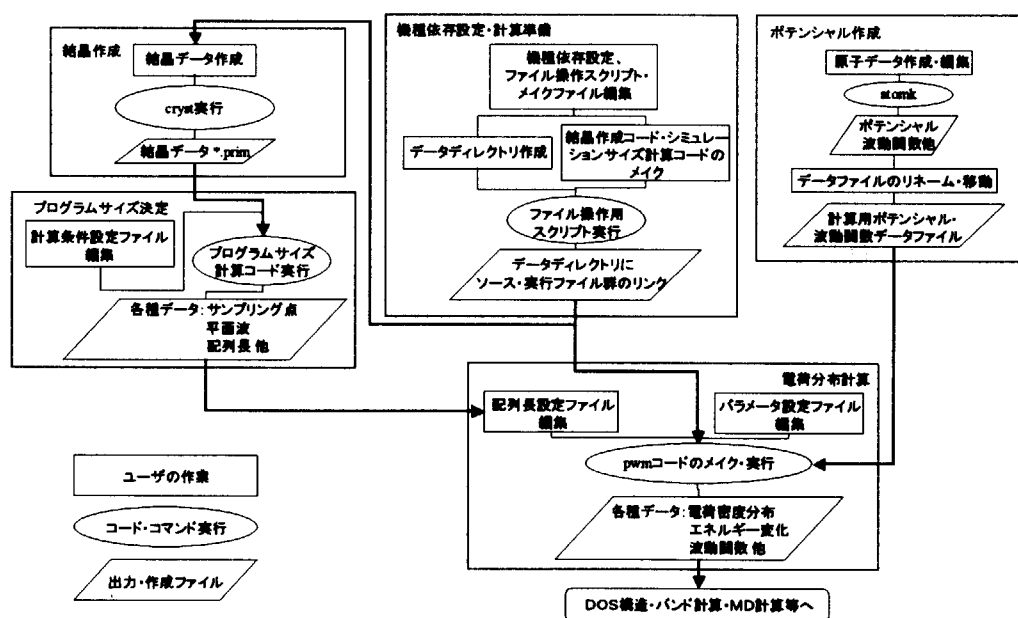


図 4-3 OSAKA-2000 の電荷分布計算を行うまでの処理フロー

4.3. Gourmet を用いた環境整備の検討

本節では、汎用シミュレーションプラットフォーム Gourmet の特徴と、PC クラスタシステムにおける Gourmet を用いたシミュレーション環境整備について述べる。

(1) Gourmet の特徴

Gourmet は、経済産業省により提案された産学連携プロジェクトである OCTA プロジェクト (<http://octa.jp>) の一環として開発されたシミュレーションプラットフォームである。このプロジェクトでは、原子・分子モデルから連続体モデルまでのスケールの異なる 4 つのシミュレーションエンジンを結び付け、マルチスケールなシミュレーションを行うことを目的としている。その共通プラットフォームとして開発された Gourmet は、スケール・形式の異なるデータを汎用技術計算書式 (UDF: User Definable Format) で統一して扱うことができる。また、エンジンマネージャを介して、ネットワークサーバ上でのエンジンの起動・停止・再起動等の制御を行うことも可能である。さらに、スクリプト言語 Python のインタフェースを持ち、データの作成・編集はもちろんのこと、ユーザの定義したデータへの変換などのデータの加工やグラフ作成、3 次元アニメーション作成に至るまで、様々な形で物理現象の解析を支援する。このように、Gourmet は高い柔軟性を持っており、OCTA プロジェクトで開発されたエンジンのみならず、任意のエンジンのインタフェースとして使用することができる。

(2) 教育用 PC クラスタの利用環境

2 章、3 章において MACHIKANEYAMA-2000 および OSAKA-2000 の導入を行った教育用 PC クラスタについて、その構成と利用環境を簡単に述べる。

教育用 PC クラスタは、国の e-Japan 計画において進められている IT 技術を活用した仮想的な共同研究環境を実現する ITBL (IT-Based Laboratory) プロジェクトにおいて、High Performance Computing などに関わる人材育成を目的として利用されている、当計算科学技術センター所有の計算機資源である。教育用 PC クラスタは、Compaq 社製の 1U ラックマウント型 IA サーバである制御ノード 1 台 + 計算ノード 32 台から構成される PC クラスタシステムである。また、教育用 PC クラスタには並列プログラミング環境として経済産業省主導のもと、新情報処理開発機構により開発が行われた SCore が導入されている。SCore については、PC クラスタコンソーシアムの WEB サイト (<http://www.pccluster.org/>) にその詳細がある。

SCore 環境において、MACHIKANEYAMA-2000 や OSAKA-2000 のように並列化が成されていないプログラム実行には、scout コマンドを使用して、Score リモートシェル環境で実行する必要がある。(ただし、未公開だが MACHIKANEYAMA-2000 については並列化されたバージョンが存在する)

(3) Gourmet による MACHIKANEYAMA-2000、OSAKA-2000 の制御

Gourmet のエンジンマネージャによりエンジンを直接制御するためには、エンジンがプラットフォームインタフェースライブラリを使ってプログラムされている必要があるが、ここでは、MACHIKANEYAMA-2000、OSAKA-2000 などのエンジンに手を加える必要のない、Gourmet-エンジン間にデータ・命令の受け渡しを行うエンジン制御プログラムを配置したシステムについて述べる。

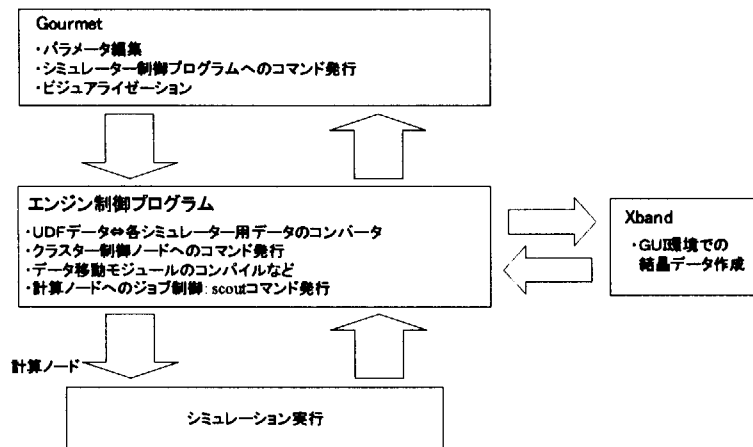


図 4-4 Gourmet からの制御

上記の図は、Gourmet とエンジン制御プログラムを利用してシミュレーションを行うシステムの概要を示している。Gourmet では、シミュレーションパラメータを UDF データ化して保持し、必要に応じて編集などを行い、エンジン制御プログラムにデータを受け渡す。エンジン制御プログラムでは、UDF データを各エンジン用のデータ形式に変換する。また、Gourmet 上でユーザが発行したエンジン制御命令は、エンジン制御プログラムに受け渡され、エンジン制御プログラムはそれに応じて PC クラスタの制御ノードに対して scout 命令等を発行して計算ノードでエンジンを起動する。シミュレーション結果はエンジン制御プログラムが UDF 化し、Gourmet に提供される。Gourmet では、そのデータに必要な処理を加え、グラフ化・アニメ化などの処理を行う。なお、現時点では Gourmet は空間群を理解するモジュールを持たないため、MACHIKANAYAMA-2000 での結晶作成はエンジン制御プログラムから Xband を起動して行うことになる。

このシステムでは、エンジン制御プログラムを「制御ノードで起動する構成」と、「ローカル端末で起動する構成」の 2 つが考えられ、その構成によって Gourmet-エンジン制御プログラム間の通信方法や動作が異なる。2 つの構成でのエンジン制御プログラムの相違点を以下に示す。

① エンジン制御プログラムと Gourmet の通信方法

Gourmet とエンジン制御プログラムとの間の通信は、(a) エンジンマネージャを利用する方法と、(b) エンジン制御プログラムに一定時間毎に特定のコントロールファイルをチェックさせ、Gourmet からエンジン制御プログラムへの命令をコントロールファイルに書き込む方法の 2 つがある。ローカル端末で起動する場合、どちらの方法を取っても問題は無い。一方、PC クラスタの制御ノードで起動する場合、(a) の手法だと、複数のユーザが 1 つのエンジンマネージャを共有するため、そのデーモンはすべてのユーザに対して上位権限を持ち、ユーザ間のセキュリティが問題となる。(b) の手法では、各ユーザがエンジン制御プログラムを常にアイドル状態にしなければならないが、エンジン制御プログラムそのものはそれほど大きな資源を必要としないため、制御ノードで起動する場合、(b) の方法を採用するのがよいと考えられる。

② エンジン制御プログラムから制御ノードへのコマンド発行

エンジン制御プログラムがローカルで起動している場合、エンジン制御プログラムから PC クラスターの制御ノードに対して rsh コマンドを発行する。制御ノードで起動している場合、直接制御ノードに対してコマンドを発行すればよい。

③ 出力データの処理

エンジンが出力したデータは、PC クラスターの制御ノードからアクセス可能な NFS ディレクトリ上に書き込まれる。それらの NFS ディレクトリはローカル PC からはアクセスできないため、出力データをグラフ化・可視化する場合、データを Gourmet の起動しているローカル PC に持ってくる必要がある。その際、エンジン制御プログラムが制御ノードにある場合、ftp コマンドで制御ノードからローカル PC にデータを put し、ローカルで起動している場合、ローカル PC から制御ノードのデータを get する。

(4) GOURMET を利用した MACHIKANEYAMA-2000 のシミュレーション

MACHIKANEYAMA-2000 では、解析対象によりプログラムで使用する配列要素の上限を適宜、変更する必要がある。これは、ソースコード内の PARAMETER 文で指定されているので解析ごとに実行モジュールを再コンパイルする必要がある。解析対象に汎用的に対応し、ユーザの操作を最小限にするために、入力データと MACHIKANEYAMA-2000 の間のインタフェースとして実行モジュールのローダーを作成した。

ローダーの仕組みは、あらかじめ想定し得る配列変数を PARAMETER 文に指定した MACHIKANEYAMA-2000 の実行モジュールを複数用意しておく。またモジュール名とモジュール選択のキーとなるデータの値の組み合わせを設定ファイルとして用意しておく。モジュール選択は、入力データ中の 1 項目で一意に決まるものではないが、入手したソースファイルでは各配列サイズのパラメータは、入力データの 27 項目の「ユニットセル内のサイト数」をキーとしていたのでローダーでもこれをキーとした。その上で、実行時にはローダーモジュールが事前に入力データを読み込み、入力データ 27 項目をキーに実行させるモジュールを設定ファイルから決定し、システムにモジュール実行を指示するものである。

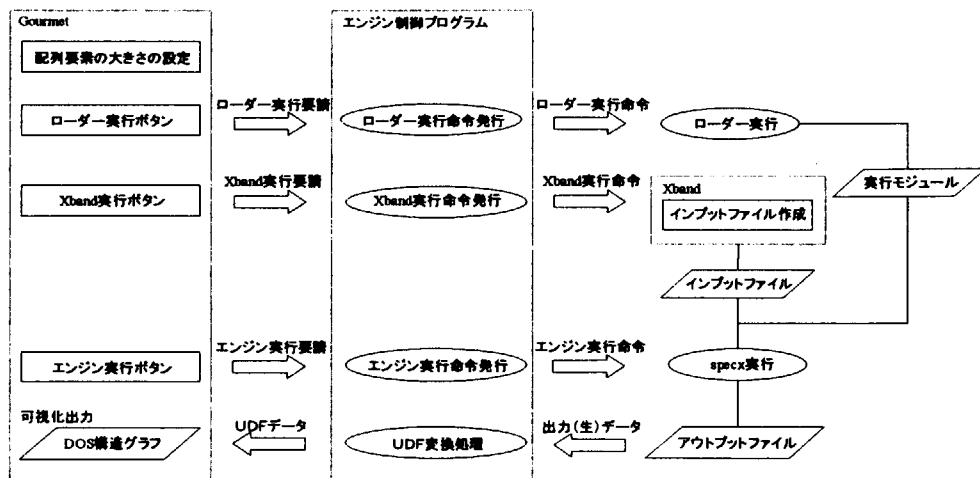


図 4-5 Gourmet を利用した MACHIKANEYAMA-2000 支援システムフロー

上記の図は、Gourmet を使用したシステムでの MACHIKANNEYAMA-2000 のシミュレーションフローを示している。配列の大きさを決定し、ローダー実行ボタンを押すと、適切な実行モジュールが選択される。その後、Gourmet 上から XBAND を起動し、結晶ファイルを作成して、エンジンを実行する。出力結果は自動的に UDF 形式に変換されて Gourmet に渡され、ユーザの要求に応じて可視化処理を行う。

(5) GOURMET を利用した OSAKA-2000 のシミュレーション

前節(2)の OSAKA-2000 のシミュレーションの流れで、セルフコンシステントな電荷分布計算までの流れが、(1)ポテンシャル作成、(2)機種依存・計算準備、(3)結晶作成、(4)プログラムサイズ決定、(5)電荷分布計算の5つのステップより成っていることを示した。

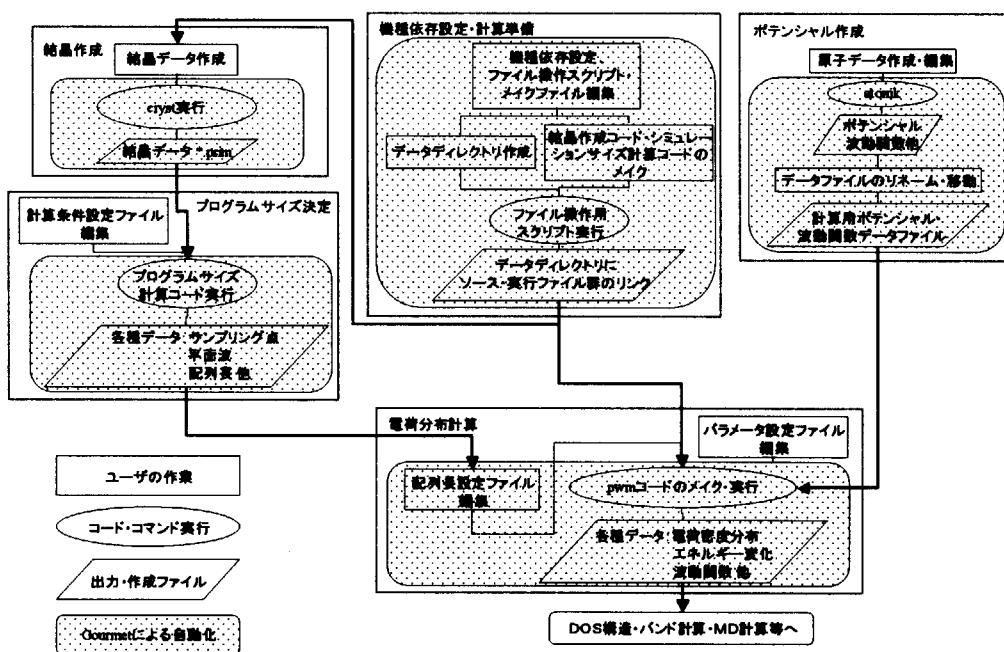


図 4-6 Gourmet を利用した OSAKA-2000 支援システムフロー

上記の図は Gourmet を使用したシステムで、このシミュレーションフローがどの程度簡略化できるかを示したものである。実行の形態は MACHIKANNEYAMA-2000 同様で、Gourmet からエンジン制御プログラムを介してエンジンを制御するが、OSAKA-2000 ではフローが複雑なため、前節の図 4-3 において簡略化できる部分を網掛けで示している。以下に、各ステップの作業がどのようになるかを示す。

① ポテンシャル作成

このステップの詳細は 3.2 節に示してある。原子ポテンシャル作成データのサンプルがおかれているディレクトリを指定すれば、自動的に計算ディレクトリへサンプルをコピーして表示する。必要があればサンプルを編集し、その後、計算を実行・出力ファイルのリネーム・ポテンシャルディレクトリへのコピーを実行する。このとき、必要があればポテンシャル・波動関数をグラフ化することもできる。なお、あらかじめカットオフ半径と電子軌道の最外殻極値点との比率を指

定しておけば、自動で再計算させることもできる。この部分でユーザが行う作業は、サンプルをそのまま使用するならサンプルディレクトリの指定の他、ボタンを数回押すだけである。

② 機種依存・計算準備

LAPACK のライブラリファイルの指定と作業するデータディレクトリを指定すれば、Makefile の編集、drivs.f のディレクトリ設定、データディレクトリの作成やリンクなど、すべての作業を自動化可能である。

③ 結晶作成

雛型となる結晶データがある場合、そのファイルを指定し、無ければ Gourmet 上から起動したエディタで作成する。その後、prim 形式データへの変換は自動で行われる。また、必要があれば、結晶データを 3 次元表示する。

④ プログラムサイズ決定

このステップの詳細は 3.4 節に示してある。まず、プログラムサイズ決定プログラム inip の入力データである inip.para を編集する。その際、結晶名などは前ステップから受け継ぐので、ユーザは必要な所を編集し埋めていく。その後、Gourmet 上から inip を実行する。

⑤ 電荷分布計算

前ステップで出力された inip.out を解析し、電荷分布計算プログラム pwm の配列長指定ファイル pwm.inc を自動編集する。ユーザはこの内容を確認し、また、実行する計算に合わせて pwm.para を編集し、pwm を実行する。実行結果は UDF 形式で保存され、計算の収束過程や等電荷密度面（フェルミ面）などのデータを可視化表示する。

この後のプロセスである DOS 構造・バンド計算、MD 計算なども、上記とほぼ同じ操作で実行可能であり、DOS 構造やバンド図なども、自動的に可視化することができる。

5. おわりに

今回、2002年9月17日から21日にかけて行われた、コンピュータシミュレーション・マテリアルズ・デザインワークショップにおいて紹介された最先端の電子状態計算手法を用いた計算コード MACHIKANAYAMA-2000 および OSAKA-2000 について、ITBL 利用推進室の教育用 PC クラスタに導入し、ユーザが利用できるように環境の整備を行った。

上記のワークショップにおいては、現時点における各計算コードの導入・利用に重点が置かれており、利用方法の統一化などは行われていない。今後、計算コードが十分に発展し、ユーザが最先端の計算コードを利用して種々の材料設計を行うという段階に入った場合、結晶モデリングを効率よく行い、計算結果が分かりやすく表示されるということが重要になってくる。そのような状況への対応として、種々の計算コードの入出力データを共通書式である UDF で取り扱い、計算コード間のデータの受け渡し、計算コードの実行制御、可視化機能を持った材料設計プラットフォームである Gourmet との連携方法について検討を行った。

マテリアルデザインにおいては従来の実験と同様、事前計画を練り、必要に応じて試行錯誤を繰り返し、計算結果から確度のある予測を引き出すことで材料開発の研究指針として利用することを期待している。しかしながら、現時点ではプログラムが十分に整備され、コミュニティやデータバンクといった周辺環境が十分に整備されているとは言い難い。このような状況が続けば、新たにマテリアルデザインにチャレンジする若い材料研究者の興味や機会を摘み取ることにもなる。今後、計算機シミュレーションによるマテリアルデザインを現実にも有効性を持つものにするには、より基礎的なレベルの研究の効率化にも役立つであろうこれらの整備を行っていく必要がある。

今回の作業では教育用 PC クラスタへの計算コードの導入・GUI 環境整備の検討に留まっているが、今後、各計算コードの発展と共に ITBL 計算機への導入や周辺環境の整備を行い、マテリアルデザイン研究の一助になることを期待している。

謝辞

本報告書の執筆にあたり、このような機会を与えていただきました ITBL 利用推進室の相川室長に感謝をいたします。「ナノマテリアルデザインコード整備」を進めるにあたり、多くのご助言をいただきました大阪大学大学院理学研究科 赤井久純教授、並びに大阪大学大学院工学研究科 笠井秀明教授に感謝をいたします。また、CMD ワークショップの準備では、計算コードの教育用 PC クラスタへの導入作業や動作確認において、ご協力をいただきました大阪大学大学院理学研究科助手 小谷岳生氏、大阪大学産業科学研究所助手 白井光雲氏、大阪大学産業科学研究所研究支援推進員 柳瀬章氏、産業技術総合研究所計算科学研究部門主任研究員 森川良忠氏に感謝をいたします。

最後になりましたが、本報告書の執筆や CMD ワークショップのサポート等で、多くのご協力をいただきました ITBL 利用推進室の皆様にお礼を申し上げます。

参考文献

- 1) 財団法人国際高等研究所：http://www.iias.or.jp/event/designworkshop/work_design.html
- 2) 吉田博：「マテリアルデザインの基礎と応用」
- 3) AkaiKKR (Machikaneyama)：<http://sham.phys.sci.osaka-u.ac.jp/~kkr/>
- 4) 佐藤和則, 小谷岳生：「Akai KKR-CPA-LDA によるバンド計算」
- 5) OSAKA2000：<http://www.cmp.sanken.osaka-u.ac.jp/~koun/osaka.html>
- 6) 白井光雲：「[OSAKA2000]Input Guide」
- 7) XBAND 2.1：<http://olymp.phys.chemie.uni-muenchen.de/ak/ebert/xband.html>
- 8) 小谷岳生：「結晶モデリングツール XBAND と将来像」
- 9) OCTA Project：<http://www.octa.jp>

This is a blank page.

国際単位系 (SI) と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s ⁻¹
力	ニュートン	N	m·kg/s ²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N·m
工率, 放射束	ワット	W	J/s
電気量, 電荷	クーロン	C	A·s
電位, 電圧, 起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラド	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光照射度	ルーメン	lm	cd·sr
照射線量	ルクス	lx	lm/m ²
放射線量	ベクレル	Bq	s ⁻¹
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量当量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名称	記号
分, 時, 日	min, h, d
度, 分, 秒	°, ', "
リットル	l, L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

1 eV = 1.60218 × 10⁻¹⁹ J
1 u = 1.66054 × 10⁻²⁷ kg

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名称	記号
オングストローム	Å
バーン	b
バル	bar
ガリ	Gal
キュリー	Ci
レントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

1 Å = 0.1 nm = 10⁻¹⁰ m
1 b = 100 fm² = 10⁻²⁸ m²
1 bar = 0.1 MPa = 10⁵ Pa
1 Gal = 1 cm/s² = 10⁻² m/s²
1 Ci = 3.7 × 10¹⁰ Bq
1 R = 2.58 × 10⁻⁴ C/kg
1 rad = 1 cGy = 10⁻² Gy
1 rem = 1 cSv = 10⁻² Sv

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10 ¹⁸	エクサ	E
10 ¹⁵	ペタ	P
10 ¹²	テラ	T
10 ⁹	ギガ	G
10 ⁶	メガ	M
10 ³	キロ	k
10 ²	ヘクト	h
10 ¹	デカ	da
10 ⁻¹	デシ	d
10 ⁻²	センチ	c
10 ⁻³	ミリ	m
10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ⁻¹⁸	アト	a

(注)

- 表1-5は「国際単位系」第5版, 国際度量衡局 1985年刊行による。ただし, 1 eV および 1 uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里, ノット, アール, ヘクターも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは, JISでは流体の圧力を表す場合に限り表2のカテゴリに分類されている。
- EC閣僚理事会指令では bar, barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリに入れている。

換算表

力	N (=10 ⁵ dyn)	kgf	lbf
	1	0.101972	0.224809
	9.80665	1	2.20462
	4.44822	0.453592	1

粘度 1 Pa·s (= N·s/m²) = 10 P (ポアズ) (g/(cm·s))

動粘度 1 m²/s = 10⁴ St (ストークス) (cm²/s)

圧	MPa (=10 bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg (Torr)	lbf/in ² (psi)
	1	10.1972	9.86923	7.50062 × 10 ³	145.038
力	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
	0.101325	1.03323	1	760	14.6959
	1.33322 × 10 ⁻⁴	1.35951 × 10 ⁻³	1.31579 × 10 ⁻³	1	1.93368 × 10 ⁻²
	6.89476 × 10 ⁻³	7.03070 × 10 ⁻²	6.80460 × 10 ⁻²	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J (=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal (計量法)	Btu	ft·lbf	eV	1 cal = 4.18605 J (計量法)
	1	0.101972	2.77778 × 10 ⁻⁷	0.238889	9.47813 × 10 ⁻⁴	0.737562	6.24150 × 10 ¹⁸	= 4.184 J (熱化学)
	9.80665	1	2.72407 × 10 ⁻⁶	2.34270	9.29487 × 10 ⁻³	7.23301	6.12082 × 10 ¹⁹	= 4.1855 J (15 °C)
	3.6 × 10 ⁶	3.67098 × 10 ⁵	1	8.59999 × 10 ⁵	3412.13	2.65522 × 10 ⁶	2.24694 × 10 ²⁵	= 4.1868 J (国際蒸気表)
	4.18605	0.426858	1.16279 × 10 ⁻⁶	1	3.96759 × 10 ⁻³	3.08747	2.61272 × 10 ¹⁹	仕事率 1 PS (仏馬力)
	1055.06	107.586	2.93072 × 10 ⁻⁴	252.042	1	778.172	6.58515 × 10 ²¹	= 75 kgf·m/s
	1.35582	0.138255	3.76616 × 10 ⁻⁷	0.323890	1.28506 × 10 ⁻³	1	8.46233 × 10 ¹⁸	= 735.499 W
	1.60218 × 10 ⁻¹⁹	1.63377 × 10 ⁻²⁰	4.45050 × 10 ⁻²⁶	3.82743 × 10 ⁻²⁰	1.51857 × 10 ⁻²²	1.18171 × 10 ⁻¹⁹	1	

放射能	Bq	Ci
	1	2.70270 × 10 ⁻¹¹
	3.7 × 10 ¹⁰	1

吸収線量	Gy	rad
	1	100
	0.01	1

照射線量	C/kg	R
	1	3876
	2.58 × 10 ⁻⁴	1

線量当量	Sv	rem
	1	100
	0.01	1

ナノマテリアルデザインコード整備 — CMDワークショップで使用した計算コードの計算例 —

R100

古紙配合率100%
白色度70%再生紙を使用しています