

文部科学省 IT プログラム 「戦略的基盤ソフトウェアの開発」

FSIS フリーソフトウェア

ナノシミュレーションシステム

CIAO version 2.16

Tutorial (050326)

■ 本ソフトウェアは文部科学省 IT プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトによる成果物です。本ソフトウェアを無償でご使用になる場合 [FSIS フリーソフトウェア利用権許諾書] をご了承頂くことが前提となります。営利目的の場合には個別契約の締結が必要です。これらの契約で明示されていない事項に関して、或いは、これらの契約が存在しない状況においては、本ソフトウェアは著作権法など、関係法令により保護されています。

■ お問い合わせ先

(公開/契約窓口)

(財) 生産技術研究奨励会

〒 153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1

(ソフトウェア監理元) 東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター

〒 153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1

FAX: 03-5452-6662

E-mail: software@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp

COPYRIGHT

Copyright (C) 1999-2005 Masakuni Okamoto, Kazuki Mae and Takenori Yamamoto.

It is understood by the authors that the Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo, distributes this program as “FSIS Free Software” with users’ agreement with the terms and conditions written in the file, LICENSE or LICENSE-J.pdf (Japanese).

HISTORY

The original version of “CIAO” was developed by Masakuni Okamoto (M.O.) of the Theory Group of Joint Research Center for Atom Technology (JRCAT), based in Tsukuba, in the period 1999-2001. Since 2002, “CIAO” has been developed by M.O. in the national project “Frontier Simulation Software for Industrial Science (FSIS)”, which is supported by the IT program of the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) of Japan.

“ppconv” has been developed in FSIS by Kazuki Mae (K.M.) since 2002. Tools in CIAO have been developed in FSIS by Takenori Yamamoto (T.Y.) and M.O since 2003.

CONTACT ADDRESS

“Frontier Simulation Software for Industrial Science” project,
The Institute of Industrial Science (IIS), The University of Tokyo
4-6-1 Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153-8505, Japan
FAX +81-(0)3-5452-6662
E-mail software@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp
URL <http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp>

* When distributing FSIS Software duplications, the user must attach the full text in this file.

Grant of License to Use FSIS Free Software (to users for non-profit purposes)

Terms and Conditions of License for Use of FSIS Free Software

The Institute of Industrial Science (IIS), University of Tokyo, hereby grants a license to use all or part of the results of “Frontier Simulation Software for Industrial Science” project (“FSIS Project”) organized by the IT Program of the Ministry of Education, Culture, Sport, Science and Technology free of charge and pursuant to the following conditions and restrictions for users for non-profit purposes. The Institute of Industrial Science (IIS), University of Tokyo, will delegate the distribution of this software to The Foundation for the Promotion for Industrial Science.

1. Definition of FSIS Free Software FSIS Free Software means any items marked “FSIS Free Software” among the project’s results including source programs, object programs, specifications, design specifications, data, implementation results and instruction manuals.

2. Extent of Free Use Users may use FSIS Free Software free of charge for purposes such as running FSIS Free Software with optional data for one’s private use, using the results thereof for one’s private use, duplicating and distributing FSIS Free Software, and modifying and then implementing FSIS Free Software.

3. Rules for Modification and Distribution If the user creates a modified version of FSIS Free Software by modifying the FSIS Free Software itself, incorporating it into other software or other such means and duplicates or distributes such software thereafter, the user must keep “FSIS free software” in the name of such software (e.g., if the FSIS free software is named Protein DF, the new software is named _____/Protein DF.) and display a copyright notice therein. The “copyright notice” segment of the internal code of the FSIS Free Software may not be altered, regardless of the reason therefore, unless it is to update or make additions to modify records such as the name of the modifier or date of modification.

4. Copyright Notice Users must display adequately and conspicuously in each FSIS Free Software duplication a copyright notice at the first part of the credits and other indications of the software with the name of the software, version, and copyright holder. When distributing FSIS Software duplications, the user must attach the full text of these Terms and Conditions without any changes.

5. User Obligations In order to publicly announce the results of using the FSIS Software, the user must clearly display the name, version and copyright holder together with the fact that such results were achieved by “using the results from the Frontier Simulation Software for Industrial Science Project.” If the user modifies the FSIS Software and publicly announces the results of running the software thereafter, the user must attach, at the time of public announcement, an explanation that will specify the contents and history of such modifications. We ask that the user report any bugs or problems discovered in the FSIS Software, to the Collaborative Research Center of Frontier Simulation Software for Industrial Science at the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo. The user may not publicly announce or disclose to a third party any bugs or problems discovered without permission.

6. Commercial Use The user must enter into a separate license agreement for commercial purposes before using the FSIS Free Software for a commercial purpose such as those set out in (1) through (3) below.

(1) Duplicating or distributing the FSIS Free Software by the user and demanding from the party to whom the user distributed the Software not only payment for the Software as a copyrighted product, but anything of economic value, including expenses required for such duplication or distribution, or indicating the need therefore.

(2) Running of the FSIS Free Software by the user, including legal entities, not for its licensed private use, but to provide services to a third party, regardless of whether such provision is free of charge.

(3) Engaging in any kind of commercial transaction such as creating a pledge or security interest over the FSIS Free Software in any form, including the parts modified by the user itself. The user acknowledges in advance that if it carries out any activity that breaches this clause, the copyright holder of any software shall prohibit the user from using the software. The user also acknowledges in advance that the copyright holder may claim indemnification for any profits equal to those gained by the user through such breach.

7. No Warranty Neither the Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo, the Foundation for the Promotion for Industrial Science nor any other concerned party warrants to the user the quality, performance, or implementation results of the FSIS Free Software in anyway. The user agrees that it is solely responsible in the use of the FSIS Free Software and if damages occur through using the Software, the user shall be responsible for all consequences; including compensations for damages and injuries incurred by a third party.

8. Breach of these Terms and Conditions If the user breaches these Terms and Conditions, the user shall unconditionally carry out any measures deemed necessary to correct any situation resulting from such breach by the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo.

- End of the terms and conditions-

FSISフリーソフトウェアの使用権許諾 (非営利使用ユーザー向け)

FSISフリーソフトウェア使用許諾条件

東京大学生産技術研究所は、次の条件や制限のもとで、文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発 (Frontier Simulation Software for Industrial Science)」プロジェクト (以下、FSIS プロジェクト) による成果物の全てまたは一部を無償で使用することを許諾します。なお、このソフトウェアは、(財) 生産技術研究奨励会が東京大学生産技術研究所の委託を受けて配布します。

1. FSISフリーソフトウェアの定義書、設計書、データ、実行結果およびマニュアルなど、FSISプロジェクトによる成果物のうち『FSISフリーソフトウェア』の標記があるものをFSISフリーソフトウェアと呼びます。

2. 無償使用の範囲ISフリーソフトウェアを任意のデータを用いて実行したり、その結果を利用者の自己のために使用する行為、FSISフリーソフトウェアを複製し頒布する行為、および、FSISフリーソフトウェアを改変しそれを実行する行為等を含みます。

3. 改変・頒布での遵守事項FSISフリーソフトウェアを変更したり他のソフトに組み込む等の行為により、改変したFSISフリーソフトウェアを複製・頒布する場合は、そのソフトウェア名にはFSISフリーソフトウェアの名称を残し (例えば、FSISフリーソフトウェアの名称をProtein DFとした場合、____/Protein DFのようにネーミング)、かつ、著作権表示を行うことを義務づけます。目的の如何を問わず、FSISフリーソフトウェア内部コードの『著作権表示』記載部分を修正する行為は、改変者氏名や改変日時などの改変記録を追加する場合を除き、禁止されています。

4. 著作権の表示戦略的基盤ソフトウェアの開発 (Frontier Simulation Software for Industrial Science)」プロジェクト (以下、FSIS プロジェクト) による成果物の全てまたは一部を無償で使用することを許諾します。なお、このソフトウェアは、(財) 生産技術研究奨励会が東京大学生産技術研究所の委託を受けて配布します。FSISプロジェクトの成果物であるソースプログラム、オブジェクトプログラム、仕様利用者がFSISフリーソフトウェアを無償で使用できる行為には、自己のためにFS利用者は、各々のFSISフリーソフトウェアの複製物に、ソフトウェア名・バージョン・著作者氏名などの著作権表示を表示の先頭部等の箇所に適切かつ目立つように掲載するとともに、頒布する場合は、複製物に本許諾条件の全文をそのまま添付しなければなりません。

5. 利用者義務FSISソフトウェアを利用した結果を公表する場合には、『戦略的基盤ソフトウェアの開発プロジェクトの成果を利用した』旨を、使用したFSISソフトウェアの名前、バージョン、著作者氏名などの記載とともに、明示して下さい。利用者がFSISソフトウェアを改変し、その実行結果を公表する場合は、改変内容や改変履歴が特定できる説明を添付して公表しなければなりません。利用者がFSISソフトウェアのバグや不具合を発見した場合、東京大学生産技術研究所計算科学技術連携研究センターに報告して下さい。発見したバグや不具合を許可なく公表したり、第三者に知らせることを禁止します。(2) 法人を含み利用者は、自己の目的に限りFSISフリーソフトウェア実行が許諾されているものであり、有償無償を問わず第三者へのサービスのためにFSISソフトウェアを実行する行為をすること。(3) 利用者は、自己が改変した部分も含み、FSISフリーソフトウェアを質権や担保など、いかなる商取引の対象に加えること。

6. 営利目的に使用する場合利用者は、FSISフリーソフトウェアを下記(1)~(3)に例示するような営利目的に使用する場合には、事前に別途営利目的の場合における使用許諾契約を締結する必要があります。(1) 利用者がFSISフリーソフトウェアを複製・頒布する場合、著作物としての対価のみならず、複製ないし頒布に必要な経費など経済的価値を、頒布を受ける者に対して提示ないし要求すること。利用者が本項に反する行為を行った場合には、各ソフトウェア等の著作権者によりその利用を差し止められることを利用者は予め了解します。かつ、利用者は、それにより得た利益相当額の賠償をもとめられることも予め了解します。

7. 無保証FSISフリーソフトウェアは、その品質や性能あるいは実行結果について、利用者に対してはいかなる保証もされていません。利用者は自己の責任において使用することに同意することとし、もし使用することにより損害が生じた場合には、第三者への損害や被害の修復も含み、その結果責任は全て利用者に帰することとします。

8. 利用者が本使用許諾条件に違反した場合利用者が本使用許諾条件に違反した場合には、利用者は、東京大学生産技術研究所がその状態を是正するために必要と認めて行う措置に無条件に従うものとします。

— 以上 —

目次

1	はじめに	1
2	パッケージの構成	1
3	コンパイルと実行	2
3.1	システム条件	2
3.2	コンパイル方法	2
3.3	実行方法	3
4	計算例	4
4.1	水素原子の全電子状態	4
4.1.1	入力データ	4
4.1.2	計算の実行と途中経過	5
4.1.3	出力データ	5
4.2	炭素原子の全電子状態	7
4.2.1	入力データ	7
4.2.2	計算の実行と途中経過	8
4.2.3	出力データ	8
4.3	炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル	12
4.3.1	入力データ	12
4.3.2	計算の実行と途中経過	13
4.3.3	出力データ	13
4.3.4	結果の表示	22
4.4	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル	27
4.4.1	入力データ	27
4.4.2	計算の実行と途中経過	28
4.4.3	出力データ	28
4.4.4	結果の表示	29
5	おわりに	39

表目次

1	make のキーワード	2
1	make のキーワード (続き)	3
2	スピン分極した炭素原子の全エネルギー	11

図目次

1	炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル (p.1)	23
2	炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル (p.2)	24
3	炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル (p.3)	24
4	炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル (p.4)	25
5	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.1)	30
6	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.2)	30
7	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.3)	31
8	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.4)	31
9	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.5)	32
10	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.6)	33
11	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.7)	34
12	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.8)	35
13	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.9)	36
14	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.10)	37
15	炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.11)	38

1 はじめに

「CIAO (Code for Investigating Atomic Orbitals)」は、密度汎関数理論に基づいて、原子の全電子状態を第一原理計算します。そこで得られた全電子ポテンシャルから擬ポテンシャルを計算します。ここで作成された擬ポテンシャルは、第一原理擬ポテンシャルバンド計算プログラム「PHASE」などの入力として用いることができます。

擬ポテンシャル法では、電子を内殻(コア)電子と価電子に分けて扱い、コア電子は原子のまわりに凍結したものとみなします。ここで、コア電子と価電子という言葉は、例えばシリコン原子の全電子配列 $[(1s)^2(2s)^2(2p)^6](3s)^2(3p)^2$ に対して、 $[(1s)^2(2s)^2(2p)^6]$ で囲まれた部分をコア電子、残りの $(3s)^2(3p)^2$ を価電子と呼ぶ習わしです。コア電子は化学結合で影響を受けにくい原子核に強く結合した電子が選ばれます。価電子は、原子核からの引力とコア電子からの斥力(遮蔽ともいう)の合わさったポテンシャルを感じるようになりますが、これを擬ポテンシャルと呼んでいます。擬ポテンシャル法では価電子のみを扱えば良いため、全電子計算に比較して計算量が少なくなるという利点があります。「CIAO」では、ノルム保存型とウルトラソフト型の擬ポテンシャルを作成することができます。

「CIAO」の電子状態計算の枠組みは、「PHASE」に代表される第一原理バンド計算と基本的に同じです。「CIAO」は対象を原子に限定することにより、ポテンシャルが球対称であることを利用して計算量を大幅に軽減しています。これにより高速計算を可能にしています。また、「CIAO」では「PHASE」では扱えないような計算を精度良く行うことができます。例えば、スピン軌道相互作用を含めた計算、相対論的なスピン電子状態の計算、軌道間クーロンエネルギーの計算などが挙げられます。その他の特長として、擬原子を作成する機能が挙げられます。

この「Tutorial」では、全電子計算と擬ポテンシャル計算の簡単な例を用いて、「CIAO」での擬ポテンシャル作成の手順を概説します。より詳しい情報は「User's Manual」にまとめましたので、そちらを参照してください。なお、「Tutorial」では特に断らない限り、原子単位系を用います。

2 パッケージの構成

「CIAO」のソースファイルは圧縮された形式の“ciao_vxxx.tar.gz” (ただし xxx はバージョン番号) で提供されています。この圧縮ファイルは、次のコマンドで解凍できます。

```
% gunzip < ciao_vxxx.tar.gz | tar xvf -
```

あるいは

```
% tar xzf ciao_vxxx.tar.gz
```

です。

解凍すると、

```
ciao_vxxx/  
  COPYRIGHT  
  LICENSE  
  LICENSE_J.pdf  
  README  
  bin/  
  doc/  
  examples/  
  outs/  
  src_ciao/  
  src_ppconv/  
  templates/  
  tools/  
  tutorials/  
  win/
```

のようなファイルやフォルダが現れます。“COPYRIGHT”、“LICENSE”、“LICENSE_J.pdf”、“README”には重要な情報が書かれてありますので一度目を通しておいてください。“bin”は実行プログラム“ciao”や“ppconv”が格納される場所です。“doc”には、マニュアル類が入っています。“examples”には計算の入力例が集められていますが、これらはあくまで例であって無保証であることに注意してください。“outs”は作業領域であり、計算

はこのフォルダ内で行います。“templates”には、入力ファイルを作成する際に役立つテンプレートが入っています。“tools”には、結果を表示するためのスクリプトが入っています。“tutorials”には、この「Tutorial」で用いる例題が入っています。“win”には、Windows用の実行ファイルが入っています。“src_ppconv”には、擬ポテンシャルの入力ファイルを変換するためのプログラムが入っています。詳しくは“doc”内のマニュアルを参照してください。最後に、“src_ciao”には以下のようなソースファイルが格納されています。

Makefile	lib_atom_table.f90	potential.f90
Makefile.Absoft	lib_bessel.f90	pp.f90
Makefile.Altix	lib_gamma.f90	pp_nc.f90
Makefile.GNU	lib_int_deriv.f90	pp_us.f90
Makefile.Generic	lib_integer.f90	reading.f90
Makefile.Hitachi	lib_kohn_sham.f90	rel_correction.f90
Makefile.Intel	lib_linalg.f90	scf.f90
Makefile.Intel2	lib_mesh.f90	sol_boundstate.f90
Makefile.Windows	lib_polynomial.f90	sol_charge.f90
args.f90	lib_real.f90	sol_fermi_level.f90
boundstate.f90	lib_string.f90	sol_init_state.f90
charge.f90	lib_time.f90	sol_logderiv.f90
convergence.f90	logderiv.f90	sol_pcc.f90
core_hole.f90	main_ciao.f90	sol_pp.f90
defaults.f90	mixing.f90	sol_scf.f90
dipole.f90	momo_xc_gga_pbe96.f90	sol_total_energy.f90
fermi_level.f90	momo_xc_lda_pw92.f90	sol_xc_momo.f90
file.f90	momo_xc_lda_pz81.f90	spin_orbit.f90
fourier.f90	momo_xc_special.f90	total_energy.f90
ghost_state.f90	parameters.f90	unboundstate.f90
hubbard.f90	pc_adams.f90	writing.f90
init_state.f90	pcc.f90	xc_momo.f90

「CIAO」のソースプログラムはFortran 90で記述されていますので、拡張子は“.f90”になります。主プログラムは“main_ciao.f90”です。

3 コンパイルと実行

3.1 システム条件

「CIAO」は、Fortran 90コンパイラが使えるシステムで構築することができます。構築には「CIAO」のソースのみで十分であり、他の数値計算ライブラリを必要としません。

3.2 コンパイル方法

コンパイルには、“src_ciao”において“make compiler”コマンドを用います。ここで、“compiler”は表1にまとめたコンパイラのいずれかをキーワードで指定します。

表 1: make のキーワード

キーワード	コンパイラ
generic	一般のコンパイラ
absoft	Absoft Pro Fortran
intel	Intel Fortran Compiler (ifc)
intel2	Intel Fortran Compiler (ifort)
gnu	GNU Fortran Compiler (g95)
altix	SGI LX3700 (efc)

表 1: make のキーワード (続き)

キーワード	コンパイラ
hitachi	Hitachi SR8000
win	Intel Visual Fortran (ifort) for Windows
help	Help メッセージを表示
-	Help メッセージを表示

キーワードを指定しないと、help メッセージが表示されます。コンパイラとして “Absoft Pro Fortran” を指定する場合、

```
% make absoft
```

と入力します。また、“Intel Fortran Compiler (ifort)” を指定する場合、

```
% make intel2
```

と入力します。もし該当するコンパイラがない場合、“make generic” を試すことをお勧めします。それでもうまくいかない場合、“Makefile.Generic” 中のコンパイルオプションを正しいもの書き換えてから “make generic” を実行してください。ちなみに、“Makefile.Generic” 中のコンパイルオプションは次のように設定されています。

```
##### Generic compiler #####
F77      = f77
F77_OPTS =
F90      = f90
F90_OPTS =
LINK     = f90
L_OPTS   =
LIBS     = -lU77
```

ここで、-lU77 はコマンドラインからのオプションの入力を可能にするライブラリであり同等の機能をもつライブラリがどのコンパイラにも付属しているはずですが、ただし、通常はデフォルトでのリンクはされていないので、Makefile 中に書く必要があります。このようにして実行ファイル “ciao” が出来上がると、最後に実行ファイルを “bin” 内に移動させるための次のコマンドを実行します。

```
% make install
```

これで、“ciao” が “bin” 内に移動します。

3.3 実行方法

「CIAO」を実行するためには、“outs” の下の作業フォルダに移動し、次節に述べる入力ファイル “input” (ファイル名は任意) を用意し、

```
% ../../../../bin/ciao input &
```

を実行します。「CIAO」の現バージョンでは、作業フォルダは “outs” の 2 階層下にあることが仮定されています。

4 計算例

数多くの入力例が

```
ciao/examples/
```

に置かれています。計算例を実行するには、該当のフォルダに移動した後、

```
% ../../../../bin/ciao input &
```

とします。興味のある例題からお試してください。入力ファイルのキーワードなどの詳しい説明は「User's Manual」を参照してください。

この「Tutorial」では、

```
ciao/tutorials/
```

にある水素原子と炭素原子の例題を用いて、「CIAO」で全電子計算と擬ポテンシャル作成を行う手順を概説します。

4.1 水素原子の全電子状態

「CIAO」の入力はキーワード形式で記述されています。大部分のパラメータにはデフォルト値が設定されていますので、必要ない場合は省略すればデフォルト値が仮定されます。キーワードを用いて書き足すことにより、そのパラメータはデフォルト値から新しい値に書き換えられます。本節では、「CIAO」の最初の実行例として、最小の入力ファイルでの計算例を紹介します。

4.1.1 入力データ

水素原子の全電子状態計算の入力例のフォルダ

```
ciao/tutorials/atom_01_H/lda/
```

に移動してください。そこには、

```
input
```

のように入力ファイル“input”があります。“input”は次のように記述されています。

```
jobname test_01_H_lda
atom_number      1      1.0
electron_config  1      nonrel  restricted
                1s     1.0    1
end
```

この入力ファイルでは、局所密度近似 (LDA-PW91) のもとで非相対論的でスピン分極の無い水素原子の全電子状態を計算することができます。

“jobname”で指定した“test_01_H_lda”は計算タイトルであり、計算結果はこのタイトルから始まる名前のファイルに出力されます。

“atom_number”は、原子番号と電子数を指定します。ここでは、原子番号が1番である水素原子が1.0個の電子を持つ状態を指定しています。

“electron_config”は電子配置を指定します。この例では、“1”はエネルギー準位数が1個、“nonrel”は非相対論、“restricted”はスピン分極を考えないことを指定しています。その後、エネルギー準位数の行数だけ各準位の情報を指定しなければなりません。この例では、1s準位の情報を1行で指定しています。最初の“1s”は、1s準位、次の“1.0”は電子数、最後の“1”は波動関数を計算することを指定しています。

“end”は入力ファイルの最後を意味します。“end”以下の行に書かれてある情報はすべて無視されます。

4.1.2 計算の実行と途中経過

「CIAO」を実行するには、

```
% ../../../../bin/ciao input &
```

とします。計算の途中経過は、

```
% grep ETOT test_01_H_lda.log
### ETOT ### etot,dee ...      1  -4.559741022438242E-01    5.440258977561758E-01
### ETOT ### etot,dee ...      2  -4.548824069926662E-01    2.394204508075816E-03
### ETOT ### etot,dee ...      3  -4.530780157476057E-01    3.966720227739287E-03
### ETOT ### etot,dee ...      4  -4.513361818917073E-01    3.844445758473292E-03
### ETOT ### etot,dee ...      5  -4.498802887315748E-01    3.225739966227278E-03
.....
.....
### ETOT ### etot,dee ...     42  -4.456666635310508E-01    8.708628792298764E-09
### ETOT ### etot,dee ...     43  -4.456666607853787E-01    6.160820089935945E-09
### ETOT ### etot,dee ...     44  -4.456666588423921E-01    4.359730659496428E-09
### ETOT ### etot,dee ...     45  -4.456666574670491E-01    3.086035221305503E-09
### ETOT ### etot,dee ...     46  -4.456666564932633E-01    2.185009386352460E-09
```

とすることで、全エネルギーの収束状況を確認することができます。

4.1.3 出力データ

計算が終了すると

```
test_01_H_lda.log
test_01_H_lda.sum
```

の2つのファイルが作られていることを確認してください。計算のログが“test_01_H_lda.log”，計算のまとめが“test_01_H_lda.sum”に出力されています。計算が終了すると、まず“.sum”ファイルを確認することをお勧めします。“test_01_H_lda.sum”の先頭には、

```
inp=====
inp test_01_H_lda
inp=====
inp Atomic label & name      :   H      Hydrogen
inp Number of protons & electrons:  1.00000  1.00000
inp--- Electron configuration -----
inp Calculation type        : Non-relativistic
inp Spin type               : Restricted
inp Spin state              : Automatic
inp      1s      1.00000    1    1    0
inp---- Ion core potential -----
inp Ion core potential type  : -Z/r
inp--- Exchange correlation -----
inp Exchange correlation type : LDA (PW92-MOMO)
inp----- Mesh -----
inp Mesh type               : Logarithmic (Standard)
inp Weight type             : Extended rule
inp Number of mesh          :      1501
inp Minimum radius (Bohr), (A):  9.82426E-06  5.19878E-06
inp Maximum radius (Bohr), (A):  6.00000E+01  3.17506E+01
inp Order & Number of diff points:      4      9
inp Order of Predictor-Corrector :      5
inp Number of EC loop        :      2
```

```

inp  Order of expansion around r=0:          5
inp----- Mixing -----
inp  Ratio of mixing rho                    :      0.3000      0.3000
inp  Order of Anderson predictor           :          0
inp----- Conv criteria -----
inp  SCF: Maximum loop                      :      150
inp  SCF: Energy convergence dE/E:         1.00000E-08
inp  WF : Energy convergence dE:          1.00000E-10
inp----- Epsilon -----
inp  Eps for checking                       :      1.00000E-10
inp----- Switches -----
inp  sw_calc_hubbard                       :          no
inp  sw_write_rho                          :          yes
inp  sw_debug                              :          no
inp-----

```

のように入力パラメータが書き出されています。ファイルの後半には、収束した電子状態の情報が出力されています。

```

oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo
oooooo                                     oooooo
oooooo      Non-Relativistic               oooooo
oooooo      Atomic States                  oooooo
oooooo                                     oooooo
oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

```

SCF calculation converged after 46 iterations.

```

eng  Energy levels [All-electron]
eng  Element ---> H
eng-----
eng  symm      Energy (Ha)          Energy (eV)  nocc      focc
eng-----
eng  1s        -0.2334568514        -6.3526838993  2  1.00000
eng-----
eng  Total number of electrons                                1.00000
eng-----

```

```

etot  Total energy [All-electron]
etot-----
etot      Energy (Ha)          Energy (eV)
etot-----
etot  Ekin      0.4248466423        11.5606648867
etot  Eion     -0.9208204011       -25.0567970139
etot  Eh        0.2827679967         7.6945083821
etot  Exc     -0.2324777410        -6.3260409505
etot-----
etot  Ekin*     0.4248634889        11.5611233060
etot  Ex       -0.1930708041        -5.2537236810
etot  Ec       -0.0394069369        -1.0723172695
etot  Vx       -0.2574277388        -7.0049649080
etot  Vc       -0.0456081937        -1.2410620477
etot  Vxc     -0.3030359325        -8.2460269556
etot  Eband    -0.2334568514        -6.3526838993
etot-----
etot  Etot     -0.4456835031       -12.1276646956
etot  Etot*    -0.4456666565       -12.1272062763

```

etot-----

計算の収束回数, エネルギー準位, および, 全エネルギーが書かれています。セルフコンシステント計算は46回で収束, $1s$ エネルギー準位は -6.3526838993 eV であり, この準位が収容できる電子2個のうち1個分が占有され, 全エネルギーは -12.1272062763 eV となったことがわかります。全エネルギーの内訳も書かれていて, E_{kin} と E_{kin}^* は運動エネルギー, E_{ion} はイオンコアエネルギー, E_h はHartreeエネルギー, E_{xc} は交換相関エネルギーです。運動エネルギーは E_{kin} と E_{kin}^* の2種類がありますが, これらは異なった方法で計算されたものです。両者が十分な精度で一致していることから計算が正しく行われたことが確認できます。これらの和が全エネルギー E_{tot} と E_{tot}^* に一致します。全エネルギーも2種類ありますが, これは運動エネルギーの計算方法の違いに対応しています。両者が十分な精度で一致していることをご確認ください。

4.2 炭素原子の全電子状態

前節の水素原子の計算例では, 入力パラメータのほとんどすべてがデフォルト値に仮定されていましたが, 本節では炭素原子を用いて, より実際的な全電子計算例を紹介します。

4.2.1 入力データ

炭素原子の全電子状態計算の入力例のフォルダ

```
ciao/tutorials/atom_06_C/lda_spin/
```

に移動してください。ここには, “input_nonrel_spin”, “input_srel_spin”, “input_rel_spin” の3つの入力ファイルが置かれています。これらは, それぞれ非相対論的, スカラー相対論的, 相対論的にスピン分極を考慮した炭素原子の全電子状態の計算を行うためのものです。例えば “input_nonrel_spin” の中身は次のように記述されています。

```
# Jobname
jobname test_06_C_lda_nonrel_spin

# Atom number & Electron configuration
# (calc_type : nonrel, srel, rel)
# (spin_type : restricted, polarized)
atom_number      6   6.0
electron_config  6   nonrel polarized manual
  1s   1.0   1.0   1
  2s   1.0   1.0   1
  2p   2.0   0.0   1
  3s   0.0   0.0   0
  3p   0.0   0.0   0
  3d   0.0   0.0   0

# Exchange-correlation potential
# (xc_type : ldapz81, ldapw91, ggapbe, xlda, none)
xc_potential     ldapw91

# Switches
sw_calc_hubbard  1
sw_write_rho     1

# End of input data
end
end
```

それでは前節の水素原子の例題で登場していなかったキーワードを説明します。

“#” で始まる行はコメント行になります。

“xc_potential” は交換相関汎関数の型を指定します。この例ではLDA(PW91)を指定しています。

“# Switches”では、計算や出力のオプションを指定します。“1”がYes, “0”がNoを表わします。デフォルトではすべて0に設定されています。この例では、“sw_calc_hubbard”で軌道間クーロンエネルギーの計算と出力、“sw_write_rho”で電子密度などの出力を指定しています。

4.2.2 計算の実行と途中経過

前節と同様に次のコマンド

```
% ../../bin/ciao input_nonrel_spin &
```

により計算をはじめます。その他の入力ファイルに対しても同様に実行すればよいです。

計算の途中経過は、“input_nonrel_spin”に対するものでは、

```
% grep ETOT test_06_C_lda_nonrel_spin.log
### ETOT ### etot,dee ...      1  -3.828954527531906E+01    3.728954527531906E+01
### ETOT ### etot,dee ...      2  -3.794629447887961E+01    8.964608850048078E-03
### ETOT ### etot,dee ...      3  -3.775102028350591E+01    5.146067568794971E-03
### ETOT ### etot,dee ...      4  -3.763945244388275E+01    2.955359584596494E-03
### ETOT ### etot,dee ...      5  -3.757464154117138E+01    1.721887501100062E-03
.....
.....
### ETOT ### etot,dee ...     37  -3.746825789388982E+01    8.292068368596910E-09
### ETOT ### etot,dee ...     38  -3.746825767764874E+01    5.771314063180537E-09
### ETOT ### etot,dee ...     39  -3.746825752714323E+01    4.016880315572092E-09
### ETOT ### etot,dee ...     40  -3.746825742239397E+01    2.795679903921120E-09
### ETOT ### etot,dee ...     41  -3.746825734948887E+01    1.945783108556617E-09
```

となります。

4.2.3 出力データ

計算が終了すると、各入力ファイルに対して3つのファイルが出力されます。3つの入力ファイルの計算を終えると、全部で9個のファイルが出力されます。

```
test_06_C_lda_nonrel_spin.log
test_06_C_lda_nonrel_spin.rho
test_06_C_lda_nonrel_spin.sum
test_06_C_lda_rel_spin.log
test_06_C_lda_rel_spin.rho
test_06_C_lda_rel_spin.sum
test_06_C_lda_srel_spin.log
test_06_C_lda_srel_spin.rho
test_06_C_lda_srel_spin.sum
```

.rhoには収束した電子密度やポテンシャルの情報が出力されています。.logは計算のログであり,.sumにはその中から重要な情報が抜粋されて出力されています。出力された.sumファイルの内容を説明するための例として“test_06_C_lda_nonrel_spin.sum”を用います。

“test_06_C_lda_nonrel_spin.sum”の先頭に書き出された入力パラメータは、

```
inp=====
inp test_06_C_lda_nonrel_spin
inp=====
inp Atomic label & name      :      C      Carbon
inp Number of protons & electrons:  6.00000  6.00000
inp--- Electron configuration -----
inp Calculation type        :  Non-relativistic
inp Spin type                :  Polarized
```

```

inp Spin state           : up & down specified
inp   1s      1.00000    1.00000    1    1    0
inp   2s      1.00000    1.00000    1    2    0
inp   2p      2.00000    0.00000    1    2    1
inp   3s      0.00000    0.00000    0    3    0
inp   3p      0.00000    0.00000    0    3    1
inp   3d      0.00000    0.00000    0    3    2
inp----- Ion core potential -----
inp Ion core potential type : -Z/r
inp----- Exchange correlation -----
inp Exchange correlation type : LDA (PW92-MOMO)
inp----- Mesh -----
inp Mesh type              : Logarithmic (Standard)
inp Weight type           : Extended rule
inp Number of mesh        : 1501
inp Minimum radius (Bohr),(A): 9.82426E-06 5.19878E-06
inp Maximum radius (Bohr),(A): 6.00000E+01 3.17506E+01
inp Order & Number of diff points: 4 9
inp Order of Predictor-Corrector : 5
inp Number of EC loop     : 2
inp Order of expansion around r=0: 5
inp----- Mixing -----
inp Ratio of mixing rho   : 0.3000 0.3000
inp Order of Anderson predictor : 0
inp----- Conv criteria -----
inp SCF: Maximum loop    : 150
inp SCF: Energy convergence dE/E: 1.00000E-08
inp WF : Energy convergence dE: 1.00000E-10
inp----- Epsilon -----
inp Eps for checking     : 1.00000E-10
inp----- Switches -----
inp sw_calc_hubbard      : yes
inp sw_write_rho         : yes
inp sw_debug             : no
inp-----

```

です。ファイルの後半に出力された収束した電子状態の情報は次のようになります。

```

oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo
oooooo                                oooooo
oooooo      Non-Relativistic          oooooo
oooooo      Atomic States             oooooo
oooooo                                oooooo
oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

```

SCF calculation converged after 41 iterations.

```

eng Energy levels [All-electron]
eng Element ---> C
eng-----
eng  symm  s      Energy (Ha)      Energy (eV)  nocc  focc
eng-----
eng  1s    +      -9.9402762094      -270.4886674324  1  1.00000
eng  1s    -      -9.9055650143      -269.5441277927  1  1.00000
eng  2s    +      -0.5309261485      -14.4472350062  1  1.00000
eng  2s    -      -0.4353981158      -11.8477850789  1  1.00000
eng  2p    +      -0.2272178247      -6.1829113515   3  2.00000

```

```

eng   2p   -   -0.1396403225   -3.7998063592   3   0.00000
eng-----
eng   Number of electrons (+)   4.00000
eng   (-)   2.00000
eng-----

```

```

etot   Total energy [All-electron]
etot-----
etot           Energy (Ha)           Energy (eV)
etot-----
etot   Ekin           37.2338357657           1013.1841819634
etot   Eion          -87.6445673270           -2384.9299279682
etot   Eh            17.7218069076             482.2348830132
etot   Exc           -4.7871028871           -130.2636922282
etot-----
etot   Ekin*          37.2416059570           1013.3956196176
etot   Ex            -4.4301912841           -120.5516337442
etot   Ec            -0.3569116030             -9.7120584840
etot   Vx            -5.9069217223           -160.7355119357
etot   Vc            -0.4003318603           -10.8935837533
etot   Vxc           -6.3072535826           -171.6290956891
etot   Eband         -21.2666011373           -578.6936380132
etot-----
etot   Etot          -37.4760275408           -1019.7745552197
etot   Etot*         -37.4682573495           -1019.5631175655
etot-----

```

セルフコンシステント計算は 41 番目のループで収束したことがわかります。スピンを考慮した計算なので、電子準位はスピンごとに書かれています。

rho data were saved into ... test_06_C_lda_nonrel_spin.rho

により電子密度データが“test_06_C_lda_nonrel_spin.rho”に出力されたことがわかります。この出力は、入力ファイルで

```
sw_write_rho      1
```

の指定があったために出力されたものです。“test_06_C_lda_nonrel_spin.rho”には、全電子計算での電子密度、イオンポテンシャル、Hartreeポテンシャル、交換ポテンシャル、相関ポテンシャルが出力されています。

その次に出力された以下のデータは、波動関数の最外側の極大半径です。

```

rmax   Positions of the outer-most maximum of G(r)
rmax-----
rmax   symm   s           rm (Bohr)           rm (A)
rmax-----
rmax   1s     +           0.1756979817           0.0929753675
rmax   1s     -           0.1756979817           0.0929753675
rmax   2s     +           1.2069476416           0.6386891835
rmax   2s     -           1.2323561370           0.6521347802
rmax   2p     +           1.1698137665           0.6190387832
rmax   2p     -           1.2452602724           0.6589633546
rmax-----

```

その次のデータは、軌道間クーロンエネルギーの計算結果です。

```

hubbard Hubbard U (On-Site Coulomb Energy) [Diagonal]
hubbard-----
hubbard   symm   m   s           Energy (Ha)           Energy (eV)

```

```

hubbard-----
hubbard 1s 0 + 1.7273213094 47.0028024736
hubbard 1s 0 - 1.7328219397 47.1524822354
hubbard 2s 0 + 0.2908549342 7.9145651392
hubbard 2s 0 - 0.2799185803 7.6169718211
hubbard 2p -1 + 0.2727434054 7.4217253840
hubbard 2p 0 + 0.2870469823 7.8109455008
hubbard 2p 1 + 0.2727434054 7.4217253840
hubbard 2p -1 - 0.2440221035 6.6401790251
hubbard 2p 0 - 0.2565055940 6.9798720728
hubbard 2p 1 - 0.2440221035 6.6401790251
hubbard-----

```

```

hubbard Hubbard U (On-Site Coulomb Energy) [Off-Diagonal]
hubbard-----
hubbard  symm  m1  s1  m2  s2      Energy (Ha)      Energy (eV)
hubbard-----
hubbard  2p  -1  +   0  +   0.2584398284      7.0325052672
hubbard  2p  -1  +   1  +   0.2727434054      7.4217253840
hubbard  2p   0  +   1  +   0.2584398284      7.0325052672
hubbard  2p  -1  -   0  -   0.2315386129      6.3004859774
hubbard  2p  -1  -   1  -   0.2440221035      6.6401790251
hubbard  2p   0  -   1  -   0.2315386129      6.3004859774
hubbard-----

```

前半は、同じ軌道間、後半は異なる軌道間のクーロンエネルギーです。

この例では、3種類の入力ファイルを用いて計算しましたが、例えば次のコマンドを実行すると、全エネルギーの比較を簡単に行うことができます。

```

% grep Etot *.sum
test_06_C_lda_nonrel_spin.sum: etot  Etot      -37.4760275408    -1019.7745552197
test_06_C_lda_nonrel_spin.sum: etot  Etot*    -37.4682573495    -1019.5631175655
test_06_C_lda_nonrel_spin.sum: etot  Etot = Ekin + Eion + Eh + Exc
test_06_C_lda_nonrel_spin.sum: etot  Etot* = Eband - Eh + (Exc - Vxc)
test_06_C_lda_rel_spin.sum: etot  Etot      -37.4845844585    -1020.0074007899
test_06_C_lda_rel_spin.sum: etot  Etot = Eband - Eh + (Exc - Vxc)
test_06_C_lda_srel_spin.sum: etot  Etot      -37.4844707524    -1020.0043066898
test_06_C_lda_srel_spin.sum: etot  Etot = Eband - Eh + (Exc - Vxc)

```

計算された E_{tot} (ただし nonrel では計算方法の同じ E_{tot}^*) を表 2 にまとめました。これより、相対論的な全エネルギーが最も大きく、スカラー相対論的なものがわずかに小さく、非相対論はかなり小さくなることがわかります。相対論的とスカラー相対論的なもののわずかなエネルギー差は、スピン軌道相互作用エネルギーです。非相対論的とスカラー相対論的なものの大きなエネルギー差は、内殻電子の質量が相対論効果によって重くなったことに起因しています。

表 2: スピン分極した炭素原子の全エネルギー

	全エネルギー (eV/atom)
非相対論	-1019.5631
スカラー相対論	-1020.0043
相対論	-1020.0074

4.3 炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル

前節では、炭素原子の全電子状態を計算しました。本節では、炭素原子のノルム保存擬ポテンシャルの計算例を紹介します。

4.3.1 入力データ

炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル計算の入力例のフォルダ

```
ciao/tutorials/atom_06_C/lda_nc/
```

に移動してください。入力ファイルは次のものです。

```
# Jobname
jobname test_06_C_lda_nc

# Atom number & Electron configuration
# (calc_type : nonrel, srel, rel)
# (spin_type : restricted, polarized)
atom_number      6   6.0
electron_config  6   srel restricted
  1s   2.0   1
  2s   2.0   1
  2p   2.0   1
  3s   0.0   0
  3p   0.0   0
  3d   0.0   0

# Exchange-correlation potential
# (xc_type : ldapz81, ldapw91, ggapbe, xlda, none)
xc_potential      ldapw91

# Pseudopotential (pp_type : nc, general, none)
pseudo_potential  nc
  local   orbital   d
  orbitals 3
  2s      1.45
  2p      1.45
  3d      1.45

# Solve PP spin
solve_pp_spin
spin polarized 2.0
mix   0.30

# End of input data
end
```

この入力ファイルを用いれば、価電子軌道として $2s$, $2p$, $3d$, すべての軌道をノルム保存 (NC), カットオフ半径は $r_{cs} = 1.45$, $r_{cp} = 1.45$, $r_{cd} = 1.45$, 局所ポテンシャルは d 軌道としたノルム保存 Troullier-Martins 型擬ポテンシャルを計算することができます。

「CIAO」で作成する擬ポテンシャルは、必ずスカラー相対論的スピン分極の無い全電子状態の結果から構成されることに注意してください。

擬ポテンシャルに対するパラメータは、“pseudo_potential” で指定します。詳しくは「User's Manual」を参照してください。ここでは、指定された内容のみを説明します。“pseudo_potential” の次の “nc” は一般入力形式を指定します。“local” は局所ポテンシャルの指定であり、この例では、 d 軌道を指定しています。“orbitals” は擬ポテンシャルを作成する価電子軌道の数であり、この例では 3 を指定しています。次に、3 つの価電子軌道のパラ

メータを指定します。順番はいつでも良いです。この例では、 $2s$ 、 $2p$ 、 $3d$ の各軌道ともカットオフ半径 1.45 Bohr を指定しています。

“solve_pp_spin”のキーワードにより、作成された擬ポテンシャルのスピン電子状態を解き直します。ここでは、全スピンの2となる状態を解きます。

「PHASE」で読み込むことのできる擬ポテンシャルの形式は、GNCPP形式とGNCPP2形式です。精度の面からGNCPP2形式の利用を推奨します。

4.3.2 計算の実行と途中経過

前節と同様に次のコマンド

```
% ../../bin/ciao input &
```

により計算を行います。

全電子エネルギーの収束状況は

```
% grep ETOT test_06_C_lda_nc.log
### ETOT ### etot,dee ...      1  -3.815483474707555E+01    3.715483474707555E+01
### ETOT ### etot,dee ...      2  -3.786628402734097E+01    7.562625330376952E-03
### ETOT ### etot,dee ...      3  -3.769797851670442E+01    4.444732694526341E-03
### ETOT ### etot,dee ...      4  -3.760003389771333E+01    2.598139816640106E-03
### ETOT ### etot,dee ...      5  -3.754202316415265E+01    1.542837267606992E-03
.....
### ETOT ### etot,dee ...     37  -3.744059771489398E+01    8.785367032223400E-09
### ETOT ### etot,dee ...     38  -3.744059748588376E+01    6.116628469391214E-09
### ETOT ### etot,dee ...     39  -3.744059732644782E+01    4.258370469032544E-09
### ETOT ### etot,dee ...     40  -3.744059721542435E+01    2.965323279701078E-09
### ETOT ### etot,dee ...     41  -3.744059713810221E+01    2.065195008190863E-09
```

となります。また、擬ポテンシャルのスピン電子状態計算の全エネルギーの収束状況を

```
% grep STOT test_06_C_lda_nc.log
### STOT ### etot,dee ...      1  -5.433271661305784E+00    4.433271661305784E+00
### STOT ### etot,dee ...      2  -5.414503476446264E+00    3.454306360784779E-03
### STOT ### etot,dee ...      3  -5.405190013230463E+00    1.720095527930712E-03
### STOT ### etot,dee ...      4  -5.400569786562377E+00    8.547759943271309E-04
### STOT ### etot,dee ...      5  -5.398264396546713E+00    4.268790343937834E-04
.....
### STOT ### etot,dee ...     18  -5.395826566174820E+00    2.402975197770577E-07
### STOT ### etot,dee ...     19  -5.395825791053433E+00    1.436520203185583E-07
### STOT ### etot,dee ...     20  -5.395825336082700E+00    8.431901820152440E-08
### STOT ### etot,dee ...     21  -5.395825076966356E+00    4.802163290203239E-08
### STOT ### etot,dee ...     22  -5.395824936564620E+00    2.602043884976640E-08
```

とすることで確認することができます。

4.3.3 出力データ

計算が終了すると、次のファイルが出力されます。

```
test_06_C_lda_nc.ciaopp      test_06_C_lda_nc.pp
test_06_C_lda_nc.ft         test_06_C_lda_nc.rho
test_06_C_lda_nc.gncpp2     test_06_C_lda_nc.sol
test_06_C_lda_nc.ldr        test_06_C_lda_nc.sum
test_06_C_lda_nc.log        test_06_C_lda_nc.us
```

まずはじめに “test_06_C_lda_nc.sum” を説明します。ファイルの先頭には、

```

inp=====
inp test_06_C_lda_nc
inp=====
inp Atomic label & name      :   C       Carbon
inp Number of protons & electrons:  6.00000  6.00000
inp--- Electron configuration -----
inp Calculation type        :  Scalar-relativistic
inp Spin type               :  Restricted
inp Spin state              :  Automatic
inp      1s      2.00000    1    1    0
inp      2s      2.00000    1    2    0
inp      2p      2.00000    1    2    1
inp      3s      0.00000    0    3    0
inp      3p      0.00000    0    3    1
inp      3d      0.00000    0    3    2
inp----- Ion core potential -----
inp Ion core potential type  :  -Z/r
inp----- Exchange correlation -----
inp Exchange correlation type :  LDA (PW92-MOMO)
inp----- Pseudopotential -----
inp Pseudopotential type    :  Troullier-Martins GNCP
inp Angular momentum of Vloc :           d
inp Angular momentum maximum :           d
inp      2s      NC           1
inp      1.45000  0.00000    0.00000
inp      2p      NC           1
inp      1.45000  0.00000    0.00000
inp      3d      NC           1
inp      1.45000  0.00000    0.00000
inp ----- PCC -----
inp PCC type                :  No core correction
inp ----- Solve PP spin -----
inp Solve PP spin type      :  Calculation
inp Spin type               :  Polarized
inp Specified spin state    :  2.00000
inp Ratio of mixing rho     :  0.30000
inp ----- Logderi -----
inp Logderi type            :  Manual range
inp Logderi method          :  Fredholm method
inp Logderi nonlocal potential :  Separable
inp Number of divisions in energy:  3001
inp Minimum energy (Ha),(eV): -1.00000E+01 -2.72114E+02
inp Maximum energy (Ha),(eV):  5.00000E+00  1.36057E+02
inp----- Fourier -----
inp Fourier transform type   :  Manual range
inp Number of divisions in k-vec :  300
inp Minimum k-vec (1/Bohr),(1/A):  5.00000E-02  9.44863E-02
inp Maximum k-vec (1/Bohr),(1/A):  1.50000E+01  2.83459E+01
inp----- Mesh -----
inp Mesh type                :  Logarithmic (Standard)
inp Weight type              :  Extended rule
inp Number of mesh           :  1501
inp Minimum radius (Bohr),(A):  9.82426E-06  5.19878E-06
inp Maximum radius (Bohr),(A):  6.00000E+01  3.17506E+01

```

```

inp Order & Number of diff points:      4      9
inp Order of Predictor-Corrector :      5
inp Number of EC loop :                 2
inp Order of expansion around r=0:      5
inp----- Mixing -----
inp Ratio of mixing rho :                0.3000    0.3000
inp Order of Anderson predictor :        0
inp----- Conv criteria -----
inp SCF: Maximum loop :                  150
inp SCF: Energy convergence dE/E:       1.00000E-08
inp WF : Energy convergence dE:         1.00000E-10
inp----- Epsilon -----
inp Eps for checking :                   1.00000E-10
inp----- Switches -----
inp sw_calc_hubbard :                    no
inp sw_write_rho :                       yes
inp sw_write_pcc :                       yes
inp sw_write_us :                        yes
inp sw_write_qps :                       yes
inp sw_write_pp :                        yes
inp sw_write_ciaopp :                    yes
inp sw_write_gncpp :                     no
inp sw_write_gncpp2 :                    yes
inp sw_write_sol :                       yes
inp sw_write_logderi :                   yes
inp sw_write_fourier :                   yes
inp sw_with_dipole :                     yes
inp sw_with_core :                       yes
inp sw_with_ae :                         no
inp sw_debug :                           no
inp-----

```

のようにデフォルト値に置き換えられた変数を含めて入力データの全情報が出力されます。

収束した全電子状態の情報はファイルの中程にあり、

```

oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo
oooooo                                oooooo
oooooo      Scalar Relativistic      oooooo
oooooo      Atomic States             oooooo
oooooo                                oooooo
oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

```

SCF calculation converged after 41 iterations.

```

eng Energy levels [All-electron]
eng Element ---> C
eng-----
eng  symm      Energy (Ha)      Energy (eV)  nocc      focc
eng-----
eng  1s        -9.9519701910    -270.8068768515  2  2.00000
eng  2s        -0.5012353821     -13.6393081754  2  2.00000
eng  2p        -0.1990292897     -5.4158623166   6  2.00000
eng-----
eng Total number of electrons                                6.00000
eng-----

```

```

etot Total energy [All-electron]
etot-----
etot          Energy (Ha)          Energy (eV)
etot-----
etot Ekin          37.2354471978      1013.2280312602
etot Eion         -87.5807031965     -2383.1920966254
etot Eh           17.6342323884        479.8518591905
etot Exc          -4.7295735278       -128.6982387727
etot-----
etot Ex           -4.3580516828       -118.5886153928
etot Ec           -0.3715218450       -10.1096233799
etot Vx           -5.8107355771       -158.1181538571
etot Vc           -0.4169429265       -11.3455938455
etot Vxc          -6.2276785036       -169.4637477027
etot Eband        -21.3044697255       -579.7240946869
etot-----
etot Etot         -37.4405971381       -1018.8104449475
etot-----

```

となります。この全エネルギーは前節で行ったスピン分極相対論的炭素原子の値(表2参照)よりわずかに浅くなっていることを確認できます。このエネルギー差は、スピン軌道相互作用とスピン分極によるものです。

その次に、波動関数の最外側の極大座標が出力されます。

```

rmax Positions of the outer-most maximum of G(r)
rmax-----
rmax  symm          rm (Bohr)          rm (A)
rmax-----
rmax  1s            0.1756979817          0.0929753675
rmax  2s            1.2195857219          0.6453769676
rmax  2p            1.1944405247          0.6320707023
rmax-----

```

その次に、擬ポテンシャルの最大半径の情報が出力されます。

```

Core charge radius (Bohr),(A):      2.7198984967      5.1398632708
Maximum ps radius (Bohr),(A):      1.4500000000      2.7401028942
1/2 of n.n. distance (B),(A):      1.4550891231      2.7497199431

```

ここで、2行めが擬ポテンシャルのカットオフ半径の最大値であり、3行めが原子間隔の最小値の半分の長さ(実験値)です。2行めの値が3行めの値より大きいと.sum ファイル中に“### CAUTION ###”メッセージが出力されます。エラーにはなりません。

その次に、擬ポテンシャルの情報が続きます。擬波動関数 ϕ の展開係数 $c_0, c_2, c_4, c_6, c_8, c_{10}, c_{12}$ と微分のチェックが $2s, 2p, 3d$ の順に

```

Troullier-Martins norm-conserving phi[n](r) was solved.
(n,l,t) :      2  0  1          NC
rc, nrc :      1.4407702920      1143
eref, de :     -0.5012353821      0.0000000000
ncoeff,nk:           6          4
c0,c2,c4 :     -0.3368862777      0.3009287937      -0.0181116278
c6,c8,c10:     -0.4570528414      0.3262135669      -0.0923338383
c12      :      0.0096948334
          rphi(rc)          rphi'(rc)          rphi''(rc)
Exact    :      0.7870693556     -0.2273943160     -0.7104720416
Analytic :      0.7870693556     -0.2273943160     -0.7104720416
Numerical:      0.7870693557     -0.2273943214     -0.7104679167
          rphi'''(rc)          rphi''''(rc)          <phi|phi>rc
Exact    :      2.2917357708     -4.6194880471      0.4868796696

```

```

Analytic :      2.2917357708      -4.6194880471
Numerical:      2.2920052141      -5.3365688461      0.4868796696

```

Troullier-Martins norm-conserving phi[n](r) was solved.

```

(n,l,t) :      2  1  1      NC
rc, nrc :      1.4407702920      1143
eref, de :     -0.1990292897      0.0000000000
ncoeff,nk:      6      4
c0,c2,c4 :      0.9017380086     -1.3937765586     -0.2775161565
c6,c8,c10:      0.7510005843     -0.4337512275      0.1118888075
c12 :      -0.0111455289
rphi(rc)      rphi'(rc)      rphi"(rc)
Exact :      0.6890850362     -0.1291825598     -0.3746144512
Analytic :    0.6890850362     -0.1291825598     -0.3746144512
Numerical:    0.6890850362     -0.1291825549     -0.3746179459
rphi'''(rc)   rphi''(rc)      <phi|phi>rc
Exact :      0.9753612579     -1.7670783005      0.4329736265
Analytic :    0.9753612579     -1.7670783005      0.4329736265
Numerical:    0.9751204988     -1.1612584267      0.4329736265

```

Troullier-Martins norm-conserving phi[n](r) was solved.

```

(n,l,t) :      3  2  1      NC
rc, nrc :      1.4407702920      1143
eref, de :     -0.1990292897      0.0000000000
ncoeff,nk:      6      4
c0,c2,c4 :      0.4149363863     -0.6593805814     -0.0483091946
c6,c8,c10:      0.2772153991     -0.1630283208      0.0417008363
c12 :      -0.0041055928
rphi(rc)      rphi'(rc)      rphi"(rc)
Exact :      1.9443221441      2.9987585672      2.6894817244
Analytic :    1.9443221441      2.9987585672      2.6894817244
Numerical:    1.9443221441      2.9987585736      2.6894785271
rphi'''(rc)   rphi''(rc)      <phi|phi>rc
Exact :      1.5013648932      1.7817834597      1.0000000000
Analytic :    1.5013648932      1.7817834596      1.0000000000
Numerical:    1.5010487561      2.3338443230      1.0000000000

```

と出力されます。Troullier-Martins 型ノルム保存擬ポテンシャルでは、カットオフ半径 rc において、擬波動関数の微分を全電子波動関数の微分と高次まで合わせることで接続しますので、その接続の精度を確認するために、擬波動関数の 4 次微分までが表示されています。

その次に、波動関数のノルム、参照エネルギー単位、カットオフ半径が、

```

Norms of psi[n] & phi[n] (0 < r < rcl) : n = (n,l,t) = (ln,tn)
n  l  t  ln  tn      <psi|psi>rcl      <phi|phi>rcl      nrcl
2  0  1  0  1  s1      0.6977676329      0.6977676329      1143
2  1  1  1  1  p1      0.6580073150      0.6580073149      1143
3  2  1  2  1  d1      1.0000000000      1.0000000000      1143

```

```

Norms of psi[n] & phi[n] (0 < r < R) : n = (n,l,t) = (ln,tn)
n  l  t  ln  tn      <psi|psi>R      <phi|phi>R      nR
2  0  1  0  1  s1      0.6977676329      0.6977676329      1143
2  1  1  1  1  p1      0.6580073150      0.6580073149      1143
3  2  1  2  1  d1      1.0000000000      1.0000000000      1143

```

```

Reference energies E[n] & cutoff radii rcl[n] : n = (n,l,t) = (ln,tn)
n  l  t  ln  tn      E[n]      rcl[n]      nrcl[n]
2  0  1  0  1  NC      -0.5012353821      1.4407702920      1143

```

```

2  1  1  1  1  NC      -0.1990292897      1.4407702920      1143
3  2  1  2  1  NC      -0.1990292897      1.4407702920      1143

```

と出力されます。ここで、psi は全電子波動関数、phi は擬波動関数を表わします。

その次に、擬ポテンシャルを Kleinman-Bylander 型の分離型にした場合のパラメータが出力されます。

Integrals of deficit charges & <Vloc*Qps[nm]> : nm = (1,tn,tm)

l	tn	tm	q[nm]	qps[nm]	<Vloc*Qps[nm]>
0	1	1	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
1	1	1	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
2	1	1	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000

Matrices B[nm], D[nm] & Dion[nm] : nm = (1,tn,tm)

l	tn	tm	B[nm]	D[nm]	Dion[nm]
0	1	1	0.3883307043	0.3883307042	0.3883307042
1	1	1	-0.1240008880	-0.1240008880	-0.1240008880
2	1	1	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000

その次に、この擬ポテンシャルを用いた場合のエネルギー準位と全エネルギーをスピン分極無しで解き直した結果が出力されます。

eng Energy levels for the present PP [Solved]

eng Element ---> C

eng	symm	Energy (Ha)	Energy (eV)	nocc	focc
eng	2s	-0.5012388665	-13.6394029924	2	2.00000
eng	2p	-0.1990308429	-5.4159045837	6	2.00000
eng	Total number of electrons				4.00000

etot Total energy for the present PP [Solved]

etot	Energy (Ha)	Energy (eV)	
etot	Ekin	3.1523644353	85.7801973905
etot	Eion[NL]	0.5286575971	14.3855045831
etot	Eion[LOC]	-12.0248438893	-327.2126378771
etot	Eh	4.3667751900	118.8259940904
etot	Exc	-1.3702943751	-37.2876056671
etot	Epcc	0.0000000000	0.0000000000
etot	Ekin*	3.1523695703	85.7803371220
etot	Eion	-11.4961862922	-312.8271332941
etot	VlocQps	0.0000000000	0.0000000000
etot	Ex	-1.1771563868	-32.0320538109
etot	Ec	-0.1931379883	-5.2555518562
etot	Vx	-1.5695418491	-42.7094050812
etot	Vc	-0.2207312279	-6.0064020798
etot	Vxc	-1.7902730770	-48.7158071610
etot	Eband	-1.4005394190	-38.1106151522
etot	Etot	-5.3473410421	-145.5085474803
etot	Etot*	-5.3473359070	-145.5084077488

Ekin と Ekin*, Etot と Etot* は 2 通りの異なる方法で計算された値です。計算精度のチェックのために表示してあります。計算誤差のために両者がわずかにずれますが、ずれが大きいと計算結果の信頼性が失われます。

次に、この擬ポテンシャルを用いた場合のエネルギー準位と全エネルギーをスピン分極を考慮して解き直した結果が出力されます。

```
eng Energy levels for the present PP [Solved]
eng Element ---> C
eng-----
eng  symm  s      Energy (Ha)      Energy (eV)  nocc    focc
eng-----
eng  2s    +      -0.5331823148    -14.5086284125  1    1.00000
eng  2s    -      -0.4286097554    -11.6630644013  1    1.00000
eng  2p    +      -0.2291099747    -6.2343993714  3    2.00000
eng  2p    -      -0.1327984850    -3.6136304968  3    0.00000
eng-----
eng  Number of electrons (+)                3.00000
eng  (-)                1.00000
eng-----
```

```
etot Total energy for the present PP [Solved]
etot-----
etot      Energy (Ha)      Energy (eV)
etot-----
etot  Ekin      3.2657490187      88.8655487665
etot  Eion[NL]   0.4909707473      13.3599932620
etot  Eion[LOC] -12.1367338637     -330.2573188744
etot  Eh        4.4212261299     120.3076794961
etot  Exc       -1.4370419306     -39.1038989928
etot  Epcc      0.0000000000      0.0000000000
etot-----
etot  Ekin*     3.2657503437      88.8655848219
etot  Eion      -11.6457631164     -316.8973256124
etot  VlocQps   0.0000000000      0.0000000000
etot  Ex       -1.2600125241     -34.2866839333
etot  Ec       -0.1770294065     -4.8172150595
etot  Vx       -1.6800166988     -45.7155785777
etot  Vc       -0.2024348079     -5.5085311806
etot  Vxc      -1.8824515068     -51.2241097583
etot  Eband    -1.4200120197     -38.6404915566
etot-----
etot  Etot     -5.3958298984     -146.8279963426
etot  Etot*    -5.3958285734     -146.8279602872
etot-----
```

次に、遷移モーメント $\langle n|r|m \rangle$ と $\langle n|p|m \rangle$ などの行列要素が出力されます。ここでは、いろいろな量が出力されますがその意味は記述を見ればわかるように出力したつもりです。詳しくは「User's Manual」を参照してください。

```
AE psi[boundstate]: n = (n1,l1), m = (n2,l2)
[n]-[m]      <n|r|m>      <n|1/r|m>      <n|pr|m>
  2s-2p      1.6276592256    0.6509137699    -0.1590975439
where pr = (1/r)*(d/dr)*r
```

```
PP phi[solved+restricted]: n = (n1,l1), m = (n2,l2)
[n]-[m]      <n|r|m>      <n|1/r|m>      <n|pr|m>
  2s-2p      1.6407567659    0.7652192659    0.0189330560
where pr = (1/r)*(d/dr)*r
```

```
AE psi[boundstate]: n = (n1,l1,m1), m = (n2,l2,m2)
```

$[n]-[m]$	$\langle n x m\rangle$	$\langle n y m\rangle$	$\langle n z m\rangle$
$2s(0)-2p(-1)$	0.0000000000	0.9397294921	0.0000000000
$2s(0)-2p(0)$	0.0000000000	0.0000000000	0.9397294921
$2s(0)-2p(1)$	0.9397294921	0.0000000000	0.0000000000

PP $\text{phi}[\text{solved+restricted}]: n = (n1,l1,m1), m = (n2,l2,m2)$

$[n]-[m]$	$\langle n x m\rangle$	$\langle n y m\rangle$	$\langle n z m\rangle$
$2s(0)-2p(-1)$	0.0000000000	0.9472913605	0.0000000000
$2s(0)-2p(0)$	0.0000000000	0.0000000000	0.9472913605
$2s(0)-2p(1)$	0.9472913605	0.0000000000	0.0000000000

AE $\text{psi}[\text{boundstate}]: n = (n1,l1,m1), m = (n2,l2,m2)$

$[n]-[m]$	$\langle n d/dx m\rangle$	$\langle n d/dy m\rangle$	$\langle n d/dz m\rangle$
$2s(0)-2p(-1)$	0.0000000000	0.2839502305	0.0000000000
$2s(0)-2p(0)$	0.0000000000	0.0000000000	0.2839502305
$2s(0)-2p(1)$	0.2839502305	0.0000000000	0.0000000000

PP $\text{phi}[\text{solved+restricted}]: n = (n1,l1,m1), m = (n2,l2,m2)$

$[n]-[m]$	$\langle n d/dx m\rangle$	$\langle n d/dy m\rangle$	$\langle n d/dz m\rangle$
$2s(0)-2p(-1)$	0.0000000000	0.4527305542	0.0000000000
$2s(0)-2p(0)$	0.0000000000	0.0000000000	0.4527305542
$2s(0)-2p(1)$	0.4527305542	0.0000000000	0.0000000000

$$[n|r|m] = \langle \text{psi}[n]|r|\text{psi}[m]\rangle - \langle \text{phi}[n]|r|\text{phi}[m]\rangle = [m|r|n]$$

$$[n|1/r|m] = \langle \text{psi}[n]|1/r|\text{psi}[m]\rangle - \langle \text{phi}[n]|1/r|\text{phi}[m]\rangle = [m|1/r|n]$$

$$[n|pr|m] = \langle \text{psi}[n]|pr|\text{psi}[m]\rangle - \langle \text{phi}[n]|pr|\text{phi}[m]\rangle = -[n|pr|m]$$

where $pr = (1/r)*(d/dr)*r$

$n = (n1,l1,t1), m = (n2,l2,t2)$

$[n]-[m]$	$[n r m]$	$[n 1/r m]$	$[n pr m]$
$2s1-2p1$	-0.0130982744	-0.1143060423	-0.1780303473
$2p1-3d1$	-0.0032934439	0.0018609812	-0.0084810782

$$[n|x|m] = \langle \text{psi}[n]|x|\text{psi}[m]\rangle - \langle \text{phi}[n]|x|\text{phi}[m]\rangle = [m|x|n]$$

$$[n|y|m] = \langle \text{psi}[n]|y|\text{psi}[m]\rangle - \langle \text{phi}[n]|y|\text{phi}[m]\rangle = [m|y|n]$$

$$[n|z|m] = \langle \text{psi}[n]|z|\text{psi}[m]\rangle - \langle \text{phi}[n]|z|\text{phi}[m]\rangle = [m|z|n]$$

$n = (n1,l1,t1,m1), m = (n2,l2,t2,m2)$

$[n]-[m]$	$[n x m]$	$[n y m]$	$[n z m]$
$2s1(0)-2p1(-1)$	0.0000000000	-0.0075622922	0.0000000000
$2s1(0)-2p1(0)$	0.0000000000	0.0000000000	-0.0075622922
$2s1(0)-2p1(1)$	-0.0075622922	0.0000000000	0.0000000000
$2p1(-1)-3d1(-2)$	-0.0014728728	0.0000000000	0.0000000000
$2p1(-1)-3d1(-1)$	0.0000000000	0.0000000000	-0.0014728728
$2p1(-1)-3d1(0)$	0.0000000000	0.0008503635	0.0000000000
$2p1(-1)-3d1(1)$	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
$2p1(-1)-3d1(2)$	0.0000000000	0.0014728728	0.0000000000
$2p1(0)-3d1(-2)$	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
$2p1(0)-3d1(-1)$	0.0000000000	-0.0014728728	0.0000000000
$2p1(0)-3d1(0)$	0.0000000000	0.0000000000	-0.0017007270
$2p1(0)-3d1(1)$	-0.0014728728	0.0000000000	0.0000000000
$2p1(0)-3d1(2)$	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
$2p1(1)-3d1(-2)$	0.0000000000	-0.0014728728	0.0000000000
$2p1(1)-3d1(-1)$	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
$2p1(1)-3d1(0)$	0.0008503635	0.0000000000	0.0000000000
$2p1(1)-3d1(1)$	0.0000000000	0.0000000000	-0.0014728728

2p1(1)-3d1(2) -0.0014728728 0.0000000000 0.0000000000

$[n|d/dx|m] = \langle \psi[n] | d/dx | \psi[m] \rangle - \langle \phi[n] | d/dx | \phi[m] \rangle = -[m|d/dx|n]$

$[n|d/dy|m] = \langle \psi[n] | d/dy | \psi[m] \rangle - \langle \phi[n] | d/dy | \phi[m] \rangle = -[m|d/dy|n]$

$[n|d/dz|m] = \langle \psi[n] | d/dz | \psi[m] \rangle - \langle \phi[n] | d/dz | \phi[m] \rangle = -[m|d/dz|n]$

n = (n1,l1,t1,m1), m = (n2,l2,t2,m2)

[n]-[m]	[n d/dx m]	[n d/dy m]	[n d/dz m]
2s1(0)-2p1(-1)	0.0000000000	-0.1687804956	0.0000000000
2s1(0)-2p1(0)	0.0000000000	0.0000000000	-0.1687804956
2s1(0)-2p1(1)	-0.1687804956	0.0000000000	0.0000000000
2p1(-1)-3d1(-2)	-0.0021283425	0.0000000000	0.0000000000
2p1(-1)-3d1(-1)	0.0000000000	0.0000000000	-0.0021283425
2p1(-1)-3d1(0)	0.0000000000	0.0012287991	0.0000000000
2p1(-1)-3d1(1)	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
2p1(-1)-3d1(2)	0.0000000000	0.0021283425	0.0000000000
2p1(0)-3d1(-2)	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
2p1(0)-3d1(-1)	0.0000000000	-0.0021283425	0.0000000000
2p1(0)-3d1(0)	0.0000000000	0.0000000000	-0.0024575982
2p1(0)-3d1(1)	-0.0021283425	0.0000000000	0.0000000000
2p1(0)-3d1(2)	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
2p1(1)-3d1(-2)	0.0000000000	-0.0021283425	0.0000000000
2p1(1)-3d1(-1)	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
2p1(1)-3d1(0)	0.0012287991	0.0000000000	0.0000000000
2p1(1)-3d1(1)	0.0000000000	0.0000000000	-0.0021283425
2p1(1)-3d1(2)	-0.0021283425	0.0000000000	0.0000000000

Definition of cubic harmonics : $Y_c[l,m] = Z[l,m]/\{\sqrt{4\pi}\cdot r^l\}$

where $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$, and $Z[l,m]$ is defined by

Z[0, 0] = 1
 Z[1, 1] = sqrt(3) * x
 Z[1, 0] = sqrt(3) * z
 Z[1,-1] = sqrt(3) * y
 Z[2, 2] = sqrt(15)/2 * (x*x-y*y)
 Z[2, 1] = sqrt(15) * x*z
 Z[2, 0] = sqrt(5)/2 * (3*z*z-r*r)
 Z[2,-1] = sqrt(15) * y*z
 Z[2,-2] = sqrt(15) * x*y

次に、擬ポテンシャルの Ghost 状態の解析結果が出力されます。

Kleinman-Bylander energies : E[KB](1,loc)

	s	p	d
s	0.000000	-4.924991	-4.234269
p	5.175955	0.000000	-1.505620
d	3.431247	-1.727463	0.000000
present	3.431247	-1.727463	0.000000

Kleinman-Bylander RMS : Vrms[KB](1,loc)

	s	p	d
s	0.000000	1.674673	0.618200
p	1.587558	0.000000	0.224204
d	1.154322	0.462825	0.000000
present	1.154322	0.462825	0.000000

Kleinman-Bylander cosines : C[KB](1,loc)

	s	p	d
s	1.000000	-0.340036	-0.145999
p	0.306718	1.000000	-0.148911
d	0.336415	-0.267922	1.553030
present	0.336415	-0.267922	1.553030

Kleinman-Bylander local energy levels : Eloc[KB] (i,l)

	s	p	d
local-1	-1.599444	-0.121257	0.000000
local-2	-0.055272	0.000000	0.000000
E[KB]	+	-	0
eigen	-0.501235	-0.199029	0.000000
ghost	none	none	none

```
oooooooooooooooooooooooooooooooooooo
ooo No ghost states exist ooo
oooooooooooooooooooooooooooooooooooo
```

細かい説明はしませんが、最後の行に ghost 状態が存在するかどうかの判定結果が表示されています。“none”が表示された軌道には ghost 状態は存在しません。“exists”と表示されると ghost が存在します。今の場合、s、p、dのすべての軌道に ghost 状態は存在しないことがわかります。なお、判定できない場合は“unknown”と表示されます。

以上が“test_06_C_lda_nc.sum”の内容でした。

擬ポテンシャルデータは、“test_06_C_lda_nc.pp”、“test_06_C_lda_nc.ciaopp”、“test_06_C_lda_nc.gncpp2”、です。前2者はCIAOPP形式であり「PHASE」では読みこむことはできません。「PHASE」で読み込むことができる形式はGNCPP形式とGNCPP2形式です(上記の場合、GNCPP2のみ)。“test_06_C_lda_nc.pp”には、全電子と価電子の電子密度、Hartreeポテンシャル、交換相関ポテンシャル、波動関数、有効ポテンシャル、イオンポテンシャルが出力されています。

その他、“test_06_C_lda_nc.rho”に全電子計算の電子密度、ポテンシャル、“test_06_C_lda_nc.sol”に擬ポテンシャルを解き直したときの波動関数、電子密度、ポテンシャル、“test_06_C_lda_nc.us”にKleinman-Bylander分離型にしたときの関数、“test_06_C_lda_nc.ldr”に波動関数の対数微分、“test_06_C_lda_nc.ft”にポテンシャルのFourier変換が格納されています。

4.3.4 結果の表示

出力データを簡単に表示するためのツールが用意されていますので、その利用法を説明します。¹次のコマンドを実行してみてください。

```
% ../../../../tools/makefig_nc.pl test_06_C_lda_nc
```

あるいは、gnuplotの比較的新しいバージョンがインストールされている場合は、

```
% ../../../../tools/makefig_nc.pl test_06_C_lda_nc -f
```

も有効です。オプション“-f”を付けると図中に表示された数値の見栄えが良くなります。コマンド実行結果、以下のファイルが自動生成されます。

```
test_06_C_lda_nc_fig.pdf          test_06_C_lda_nc_sol_rho.eps
test_06_C_lda_nc_ft.eps          test_06_C_lda_nc_sol_rphi.eps
test_06_C_lda_nc_ldr.eps         test_06_C_lda_nc_sol_vloc.eps
test_06_C_lda_nc_ldr_std.eps     test_06_C_lda_nc_us_gbeta.eps
test_06_C_lda_nc_pp_rho.eps      test_06_C_lda_nc_us_gphi.eps
test_06_C_lda_nc_pp_rphi.eps     test_06_C_lda_nc_us_rbeta.eps
test_06_C_lda_nc_pp_vps.eps      test_06_C_lda_nc_us_rphi.eps
```

これらのepsファイルをまとめたものが、pdfファイルです。このファイルを開くと以下に列挙する図が数ページにわたって表示されます。

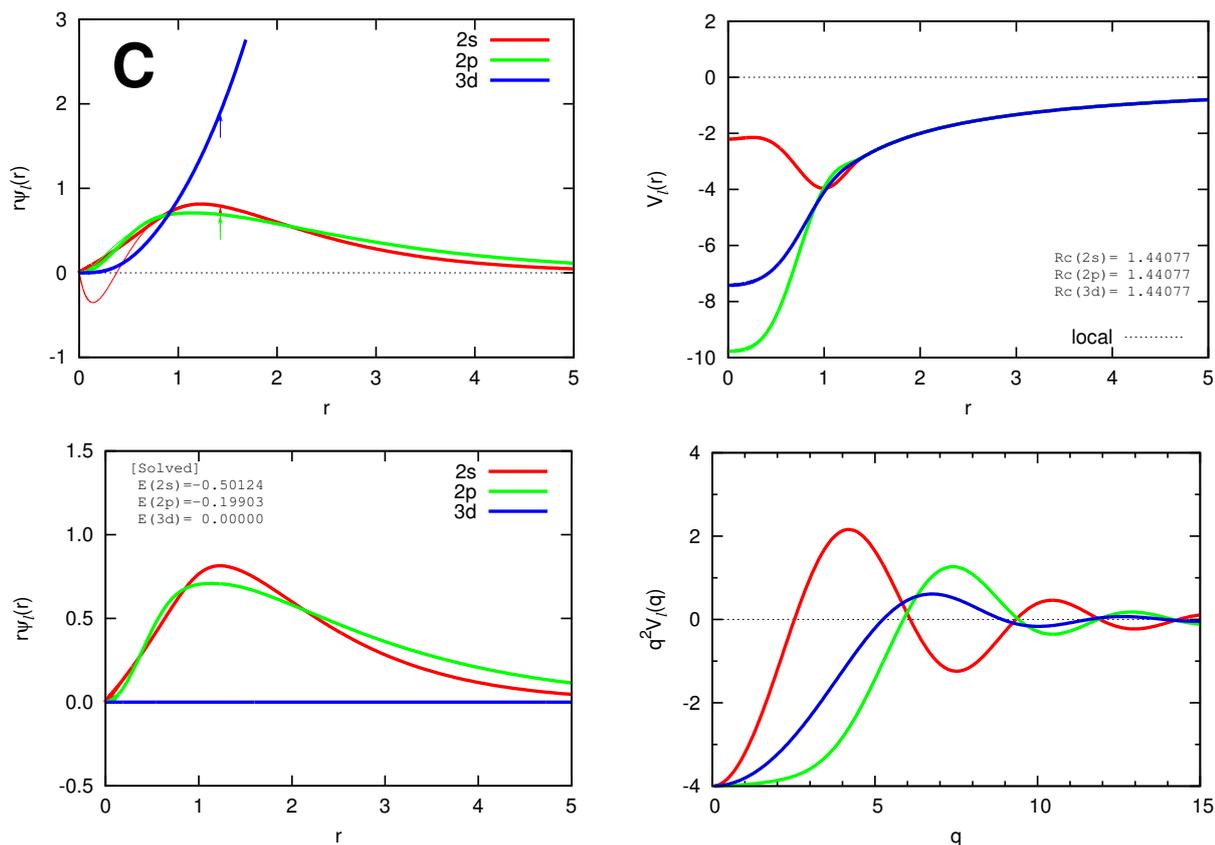


図 1: 炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル (p.1): 波動関数 (左上), 解き直した波動関数 (左下), 擬ポテンシャル (右上), 擬ポテンシャルの Fourier 変換 (右下) を表示しています。左上図では, 波動関数は s と p は束縛, d は非束縛軌道となります。矢印はカットオフ半径を示しています。非束縛軌道は途中までしか表示していません。細線が全電子波動関数, 太線が擬波動関数を表わします。左下図では, 擬ポテンシャルを解き直した結果なので束縛軌道のみが表示されます。解かれた固有エネルギーの値も記入されます。

まず, 1 ページめには図 1 のように, 波動関数や擬ポテンシャルが表示されます。
次に, 2 ページめには図 2 のように, 波動関数の対数微分のエネルギー依存性が表示されます。
次に, 3 ページめには図 3 のように, 電子密度とポテンシャルが表示されます。
最後に, 4 ページめには図 4 のように, 分離型ポテンシャルの関数が表示されます。

¹これらのツールを実行するには, gnuplot と latex があらかじめインストールされていることが仮定されています。

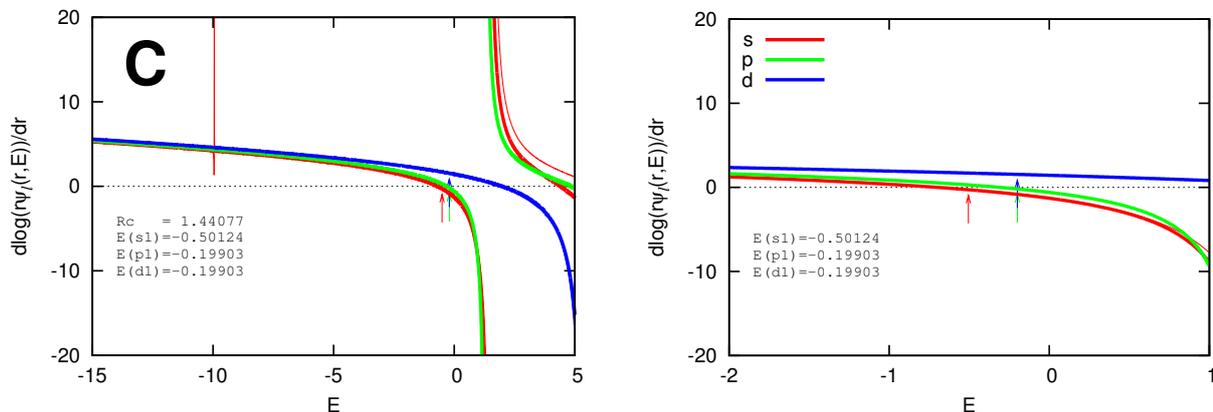


図 2: 炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル (p.2): 波動関数の対数微分を表示しています。左図はエネルギーの広い範囲, 右図は固有エネルギー付近の表示となります。矢印は参照エネルギーを示しています。表示された R_c は対数微分をとる半径, エネルギーは参照エネルギーの値です。細線が全電子波動関数, 太線が擬波動関数であり, 両者が一致していることが望ましいです。左図で細線が発散していないところで太線が発散している場合は ghost 状態が存在することが考えられます。

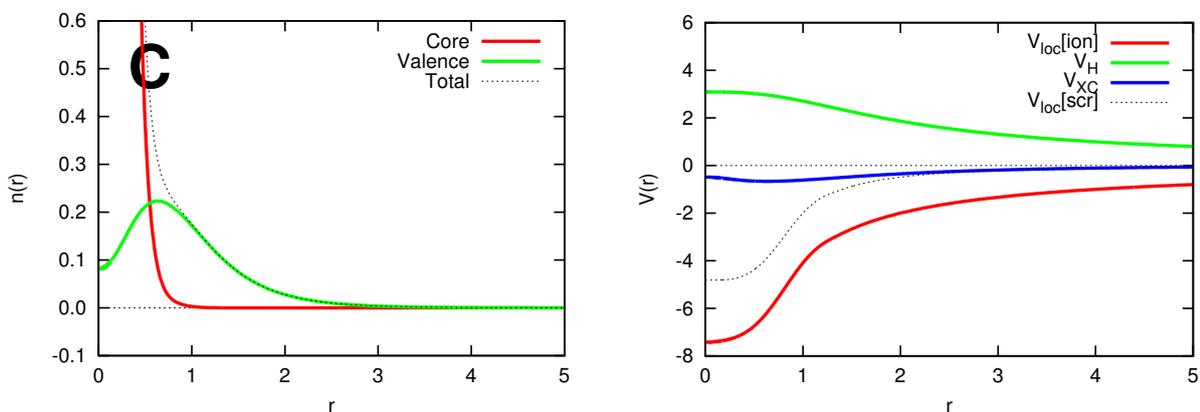


図 3: 炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル (p.3): 電子密度 (左), ポテンシャル (右) を表示しています。左図では, 点線が全電子密度, 赤線がコア電子密度, 緑線が価電子密度です。右図では, 点線が遮蔽局所ポテンシャル, 赤線がイオン化局所ポテンシャル, 緑線が Hartree ポテンシャル, 青線が交換相関ポテンシャルを表わしています。

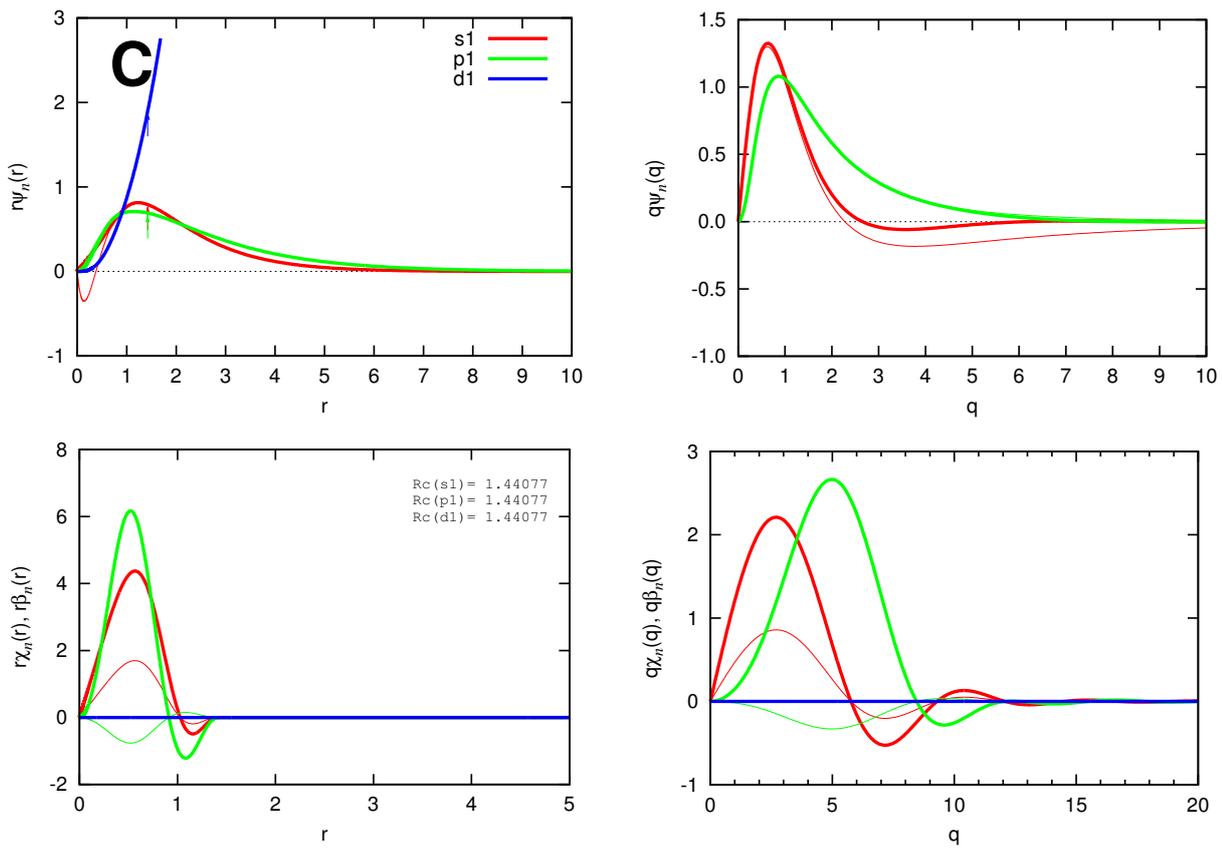


図 4: 炭素原子のノルム保存擬ポテンシャル (p.4): 波動関数 (左上), 波動関数の Fourier 変換 (右上), 射影関数 (左下), 射影関数の Fourier 変換 (右下) を表示しています。

CIAOPP 形式のデータはキーワードを用いて汎用的に記述されています。今の場合，“test_06_C_lda_nc.ciaopp” の先頭部分は次のようになっています。

```

### Atomic label
atomic_label      C          Carbon

### Atomic charge : Z, Za, Zc, Zv, (Ne, Nc, Nv)
atomic_charge     6          6.00000   2.00000   4.00000
                  6.00000   2.00000   4.00000

### Exchange-correlation potential
xc_potential      ldapw91     momo

### r-Mesh : Nmesh, rmin, rmax
rmesh             logarithmic
                  1501      9.824262783544876E-06   6.000000000000000E+01

### g-Mesh : Nmesh, gmin, gmax
gmesh             linear
                  601       0.000000000000000E+00   3.000000000000000E+01

### All-electron SCF energy levels
#AE      scalar_relativistic
#AE  symm      Energy (Ha)          Energy (eV)  nocc      focc
#AE  1s        -9.9519701910        -270.8068768515   2   2.00000
#AE  2s        -0.5012353821         -13.6393081754   2   2.00000
#AE  2p        -0.1990292897         -5.4158623166    6   2.00000
#AE  Total number of electrons                    6.00000

### All-electron total energy
#AE      Energy (Ha)          Energy (eV)
#AE  Ekin      37.2354471978      1013.2280312602
#AE  Eion      -87.5807031965     -2383.1920966254
#AE  Eh        17.6342323884        479.8518591905
#AE  Exc       -4.7295735278         -128.6982387727
#AE  Etot      -37.4405971381         -1018.8104449475

```

.....

データの構造に関しては「User's Manual」を参照してください。CIAOPP データを表示するツールは“makefig_ciaopp.pl”です。次のコマンドを入力してみてください。

```
% ../../../../tools/makefig_ciaopp.pl test_06_C_lda_nc
```

その結果、次のファイルが出力されます。

```

ciaopp_test_06_C_lda_nc.pdf          ciaopp_test_06_C_lda_nc_rbeta.eps
ciaopp_test_06_C_lda_nc_gbeta.eps    ciaopp_test_06_C_lda_nc_rho.eps
ciaopp_test_06_C_lda_nc_gphi.eps     ciaopp_test_06_C_lda_nc_rphi.eps
ciaopp_test_06_C_lda_nc_ldr.eps      ciaopp_test_06_C_lda_nc_vloc.eps
ciaopp_test_06_C_lda_nc_ldr_std.eps

```

このうち，“ciaopp_test_06_C_lda_nc.pdf” にすべてのグラフがまとめられていますのでご覧になってください。“test_06_C_lda_nc_fig.pdf” ほどの情報はありませんが、対数微分や Fourier 変換など十分な情報が表示されていることがわかつています。

4.4 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル

前節では、炭素原子のノルム保存擬ポテンシャルの作成例を紹介しました。本節では、炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャルの計算例を紹介します。

炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル計算の入力例のフォルダ

```
ciao/tutorials/atom_06_C/lda_us/
```

に移動してください。

以下、手続きは前節でのノルム保存の場合と同様です。

4.4.1 入力データ

入力ファイルは以下のようになっています。

```
# Jobname
jobname test_06_C_lda_us

# Atom number & Electron configuration
# (calc_type : nonrel, srel, rel)
# (spin_type : restricted, polarized)
atom_number      6  6.0
electron_config  6  srel restricted
  1s  2.0  1
  2s  2.0  1
  2p  2.0  1
  3s  0.0  0
  3p  0.0  0
  3d  0.0  0

# Exchange-correlation potential
# (xc_type : ldapz81, ldapw91, ggapbe, xlda, none)
xc_potential  ldapw91

# Pseudopotential (pp_type : nc, general, none)
# (local : orbital, special)
pseudo_potential  general
  local      orbital    d
  orbitals    3
  2s          us        2
             1.30      0.00  0.8
             1.30      0.30  0.8
  2p          us        2
             1.35      0.00  0.8
             1.35     -0.30  0.8
  3d          nc        1
             1.40      0.00  0.8
  phi_np      5
  phi_gmesh   800      4.00  40.0
  qps_np      5
  qps_gmesh   600     14.00  40.0

# Solve PP spin
solve_pp_spin
  spin polarized  2.0
  mix   0.30
```

```
# End of input data
end
```

ノルム保存の場合と異なるのは、ウルトラソフトのパラメータの指定を行う “pseudo_potential general” のブロックです。詳しくは「User’s Manual」を参照してください。

4.4.2 計算の実行と途中経過

前節と同様に次のコマンド

```
% ../../../../bin/ciao input &
```

により計算を行います。計算時間は、ノルム保存の場合の数倍の時間を要します。
全電子エネルギーの収束状況は

```
% grep ETOT test_06_C_lda_us.log
### ETOT ### etot,dee ... 1 -3.815483474707555E+01 3.715483474707555E+01
### ETOT ### etot,dee ... 2 -3.786628402734097E+01 7.562625330376952E-03
### ETOT ### etot,dee ... 3 -3.769797851670442E+01 4.444732694526341E-03
### ETOT ### etot,dee ... 4 -3.760003389771333E+01 2.598139816640106E-03
### ETOT ### etot,dee ... 5 -3.754202316415265E+01 1.542837267606992E-03
.....
### ETOT ### etot,dee ... 37 -3.744059771489398E+01 8.785367032223400E-09
### ETOT ### etot,dee ... 38 -3.744059748588376E+01 6.116628469391214E-09
### ETOT ### etot,dee ... 39 -3.744059732644782E+01 4.258370469032544E-09
### ETOT ### etot,dee ... 40 -3.744059721542435E+01 2.965323279701078E-09
### ETOT ### etot,dee ... 41 -3.744059713810221E+01 2.065195008190863E-09
```

となります。また、擬ポテンシャルのスピン電子状態計算の全エネルギーの収束状況は

```
% grep STOT test_06_C_lda_us.log
### STOT ### etot,dee ... 1 -5.435080750999449E+00 4.435080750999449E+00
### STOT ### etot,dee ... 2 -5.416265336131625E+00 3.461846425071904E-03
### STOT ### etot,dee ... 3 -5.406912065982366E+00 1.726885514057682E-03
### STOT ### etot,dee ... 4 -5.402268049541639E+00 8.589036374284001E-04
### STOT ### etot,dee ... 5 -5.399951364150100E+00 4.288356983202974E-04
.....
### STOT ### etot,dee ... 17 -5.397526958014077E+00 3.125834851811679E-07
### STOT ### etot,dee ... 18 -5.397525998648048E+00 1.777417763260264E-07
### STOT ### etot,dee ... 19 -5.397525470996964E+00 9.775795129973442E-08
### STOT ### etot,dee ... 20 -5.397525195500675E+00 5.104122071739098E-08
### STOT ### etot,dee ... 21 -5.397525066009961E+00 2.399075677484586E-08
```

となります。

4.4.3 出力データ

計算が正常に行われると、以下のファイルが生成されます。

```
test_06_C_lda_us.ciaopp      test_06_C_lda_us.rho
test_06_C_lda_us.gncpp2     test_06_C_lda_us.sol
test_06_C_lda_us.ldr        test_06_C_lda_us.sum
test_06_C_lda_us.log        test_06_C_lda_us.us
test_06_C_lda_us.qps
```

ウルトラソフトで新たに登場したファイルは、デフィシト電荷データである “test_06_C_lda_us.qps” です。

4.4.4 結果の表示

結果を表示するには,

```
% ../../../../tools/makefig_us.pl test_06_C_lda_us
```

あるいは

```
% ../../../../tools/makefig_us.pl test_06_C_lda_us -f
```

を実行します。その結果、以下の大量の eps ファイルが生成されます。

```
test_06_C_lda_us_fig.pdf          test_06_C_lda_us_qps_rrq_s2p2.eps
test_06_C_lda_us_ldr.eps          test_06_C_lda_us_qps_rrq_s2s2.eps
test_06_C_lda_us_ldr_std.eps      test_06_C_lda_us_sol_rho.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_p1p1.eps test_06_C_lda_us_sol_rphi.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_p1p2.eps test_06_C_lda_us_sol_vloc.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_p2p2.eps test_06_C_lda_us_us_gbeta.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_s1p1.eps test_06_C_lda_us_us_gbeta_d.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_s1p2.eps test_06_C_lda_us_us_gbeta_p.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_s1s1.eps test_06_C_lda_us_us_gbeta_s.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_s1s2.eps test_06_C_lda_us_us_gphi.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_s2p1.eps test_06_C_lda_us_us_gphi_d.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_s2p2.eps test_06_C_lda_us_us_gphi_p.eps
test_06_C_lda_us_qps_ggq_s2s2.eps test_06_C_lda_us_us_gphi_s.eps
test_06_C_lda_us_qps_rrq_p1p1.eps test_06_C_lda_us_us_rbeta.eps
test_06_C_lda_us_qps_rrq_p1p2.eps test_06_C_lda_us_us_rbeta_d.eps
test_06_C_lda_us_qps_rrq_p2p2.eps test_06_C_lda_us_us_rbeta_p.eps
test_06_C_lda_us_qps_rrq_s1p1.eps test_06_C_lda_us_us_rbeta_s.eps
test_06_C_lda_us_qps_rrq_s1p2.eps test_06_C_lda_us_us_rphi.eps
test_06_C_lda_us_qps_rrq_s1s1.eps test_06_C_lda_us_us_rphi_d.eps
test_06_C_lda_us_qps_rrq_s1s2.eps test_06_C_lda_us_us_rphi_p.eps
test_06_C_lda_us_qps_rrq_s2p1.eps test_06_C_lda_us_us_rphi_s.eps
```

これらの図が pdf ファイルにまとめて表示されます。

まず、1 ページめは図 5 のように、波動関数が表示されます。

次に、2 ページめは図 6 のように、波動関数の対数微分が表示されます。

次に、3 ページめは図 7 のように、電子密度とポテンシャルが表示されます。

次に、4 ページめは図 8 のように、 s 軌道に対する分離型ポテンシャルの波動関数が表示されます。

次に、5 ページめは図 9 のように、 p 軌道に対する分離型ポテンシャルの波動関数が表示されます。

次に、6 ページめは図 10 のように、 d 軌道に対する分離型ポテンシャルの波動関数が表示されます。

7 ページ以降 (~9 ページ) はデフィント電荷密度関数の情報です。

7 ページめを図 11 に示します。

8 ページめを図 12 に示します。

9 ページめを図 13 に示します。

10 ページめを図 14 に示します。

11 ページめを図 15 に示します。

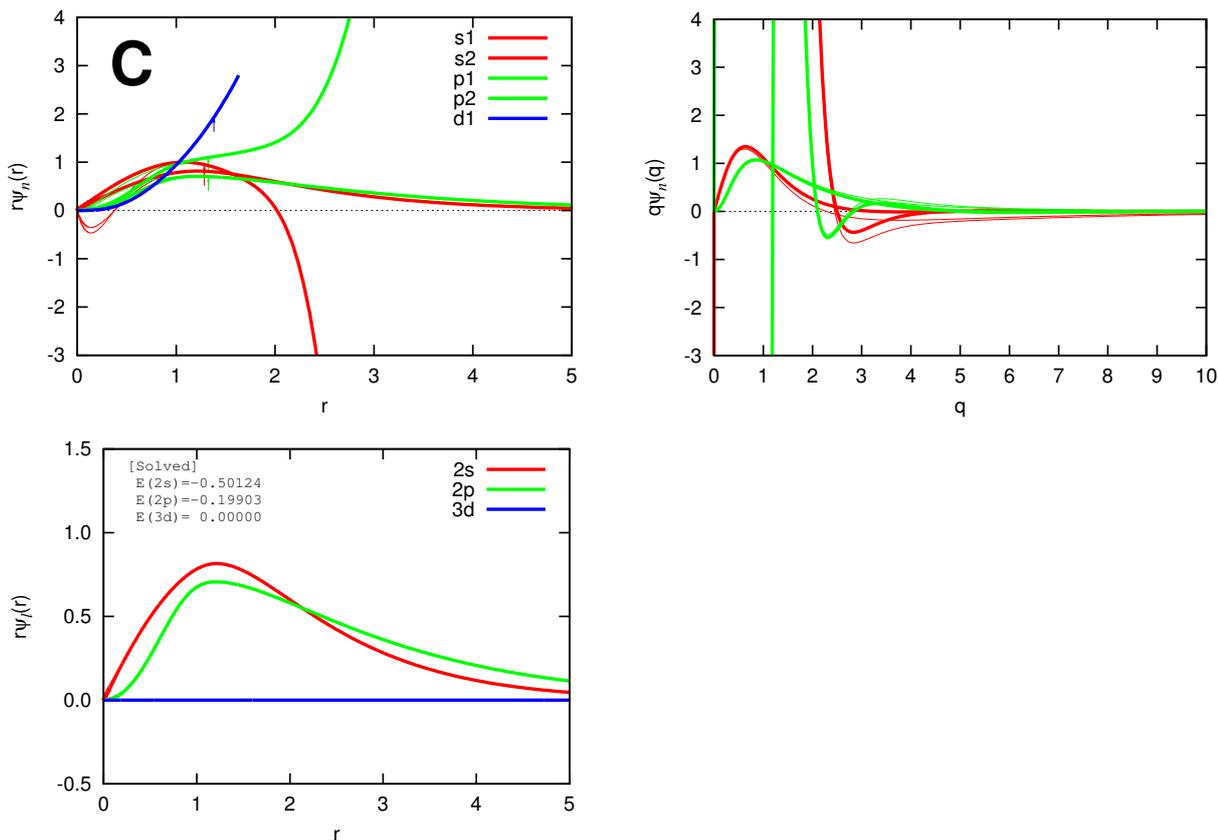


図 5: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.1): 波動関数 (左上), 波動関数の Fourier 変換 (右上), 解き直した波動関数 (左下) を表示しています。左上図では, 波動関数は s は束縛軌道と非束縛軌道の 2 種類, p は束縛軌道と非束縛軌道の 2 種類, d は非束縛軌道となります。矢印はカットオフ半径を示しています。非束縛軌道は途中までしか表示していません。左下図では, 擬ポテンシャルを解き直した結果なので束縛軌道のみが表示されます。解かれた固有エネルギーの値も記入されます。右上図は波動関数の Fourier 変換であり, ゼロとなる q 値が波動関数のカットオフエネルギーの目安になります。

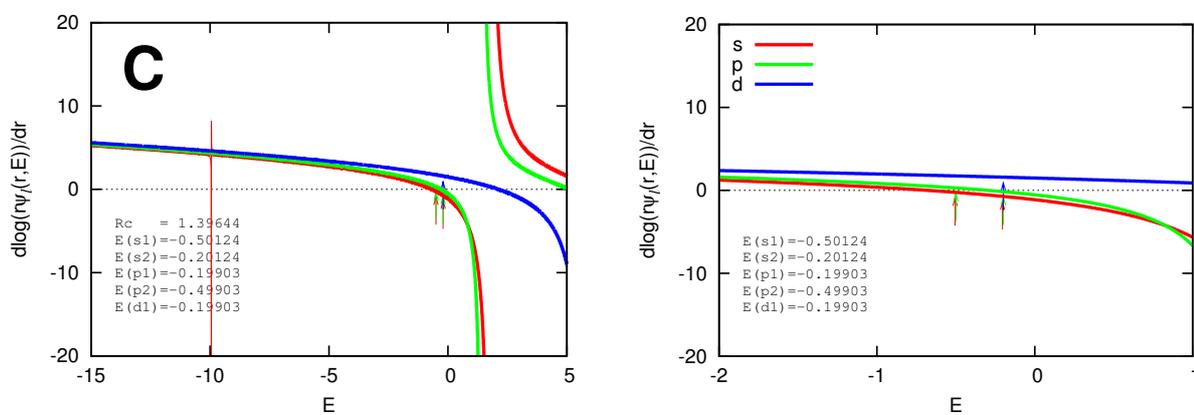


図 6: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.2): 波動関数の対数微分を表示しています。左図はエネルギーの広い範囲, 右図は固有エネルギー付近の表示となります。矢印は参照エネルギーを示しています。表示された R_c は対数微分をとる半径, エネルギーは参照エネルギーの値です。細線が全電子波動関数, 太線が擬波動関数であり, 両者が一致していることが望ましいです。左図で細線が発散していないところで太線が発散している場合は ghost 状態が存在することが考えられます。

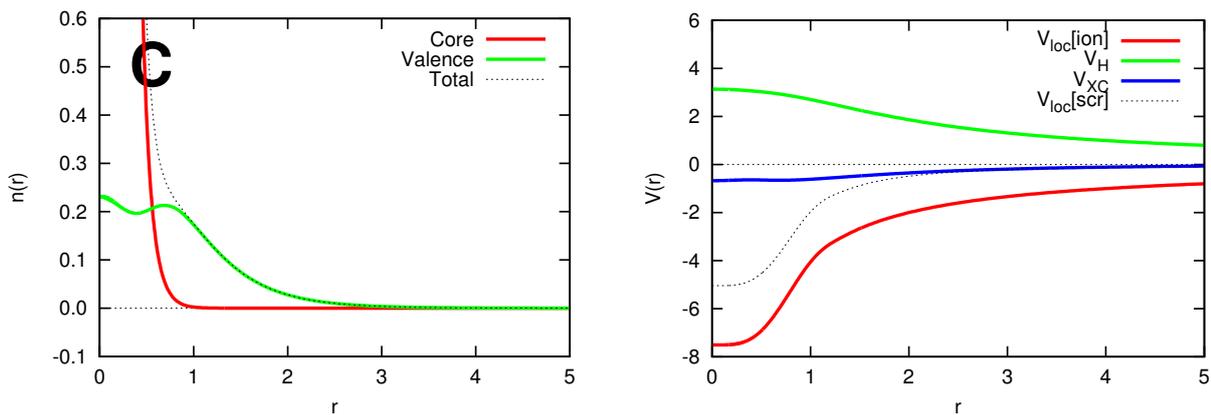


図 7: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.3) : 電子密度 (左), ポテンシャル (右) を表示しています。左図では, 点線が全電子密度, 赤線がコア電子密度, 緑線が価電子密度です。右図では, 点線が遮蔽局所ポテンシャル, 赤線がイオン化局所ポテンシャル, 緑線が Hartree ポテンシャル, 青線が交換相関ポテンシャルを表わしています。

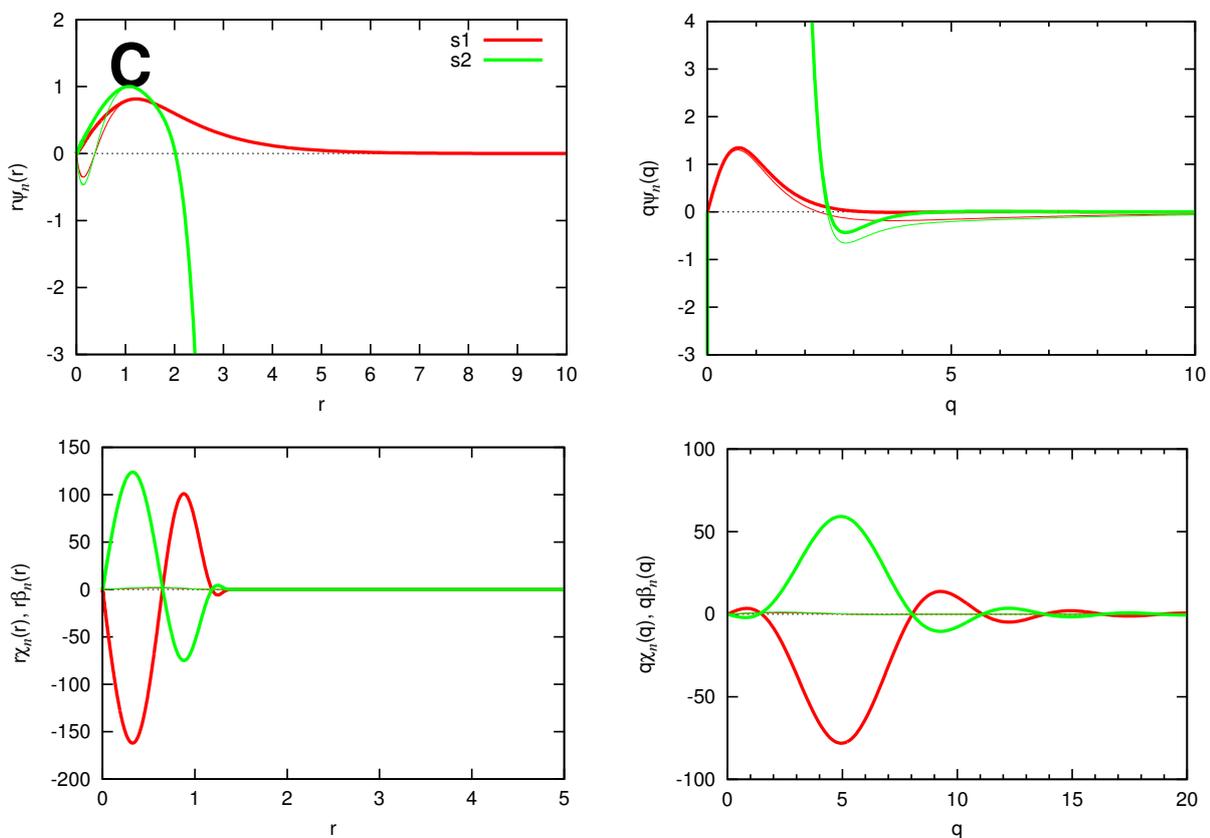


図 8: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.4) : s 軌道波動関数 (左上), s 軌道波動関数の Fourier 変換 (右上), s 軌道射影関数 (左下), s 軌道射影関数の Fourier 変換 (右下) を表示しています。

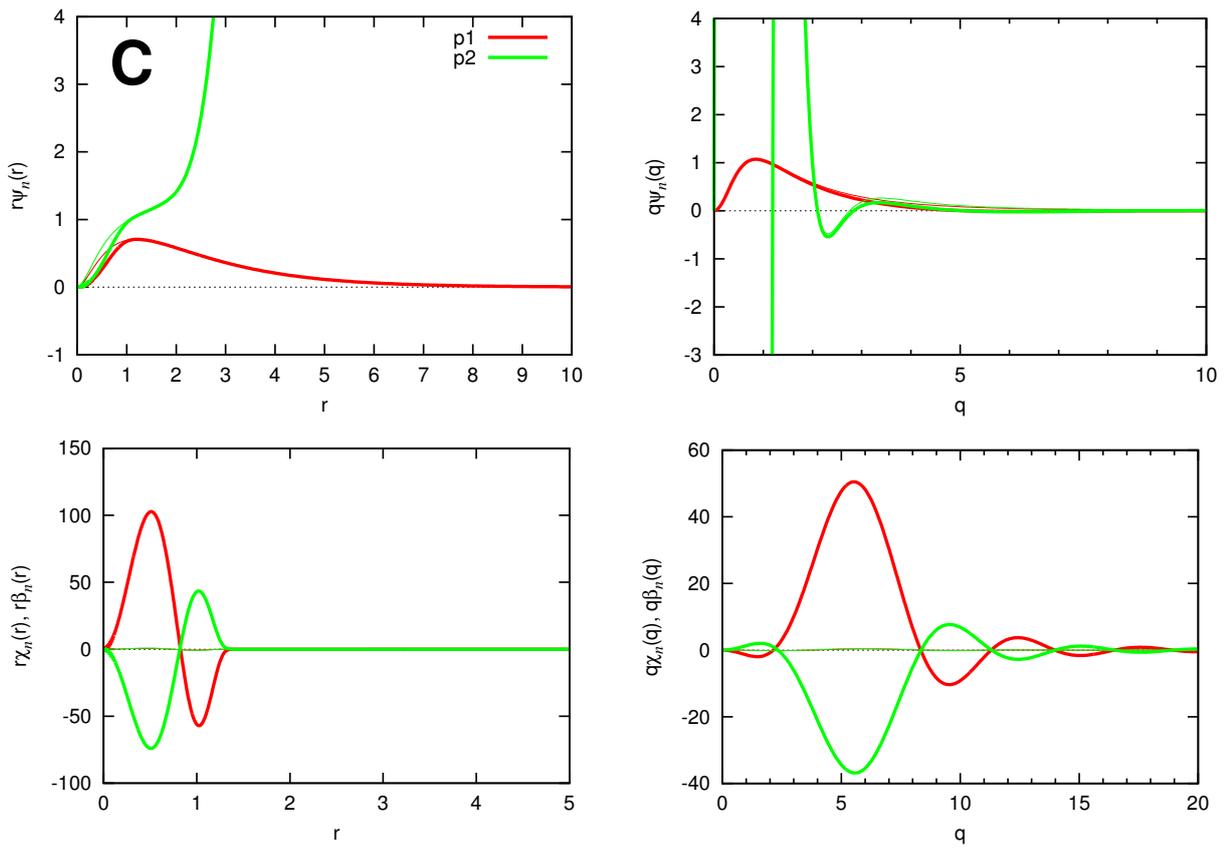


図 9: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.5): p 軌道波動関数 (左上), p 軌道波動関数の Fourier 変換 (右上), p 軌道射影関数 (左下), p 軌道射影関数の Fourier 変換 (右下) を表示しています。

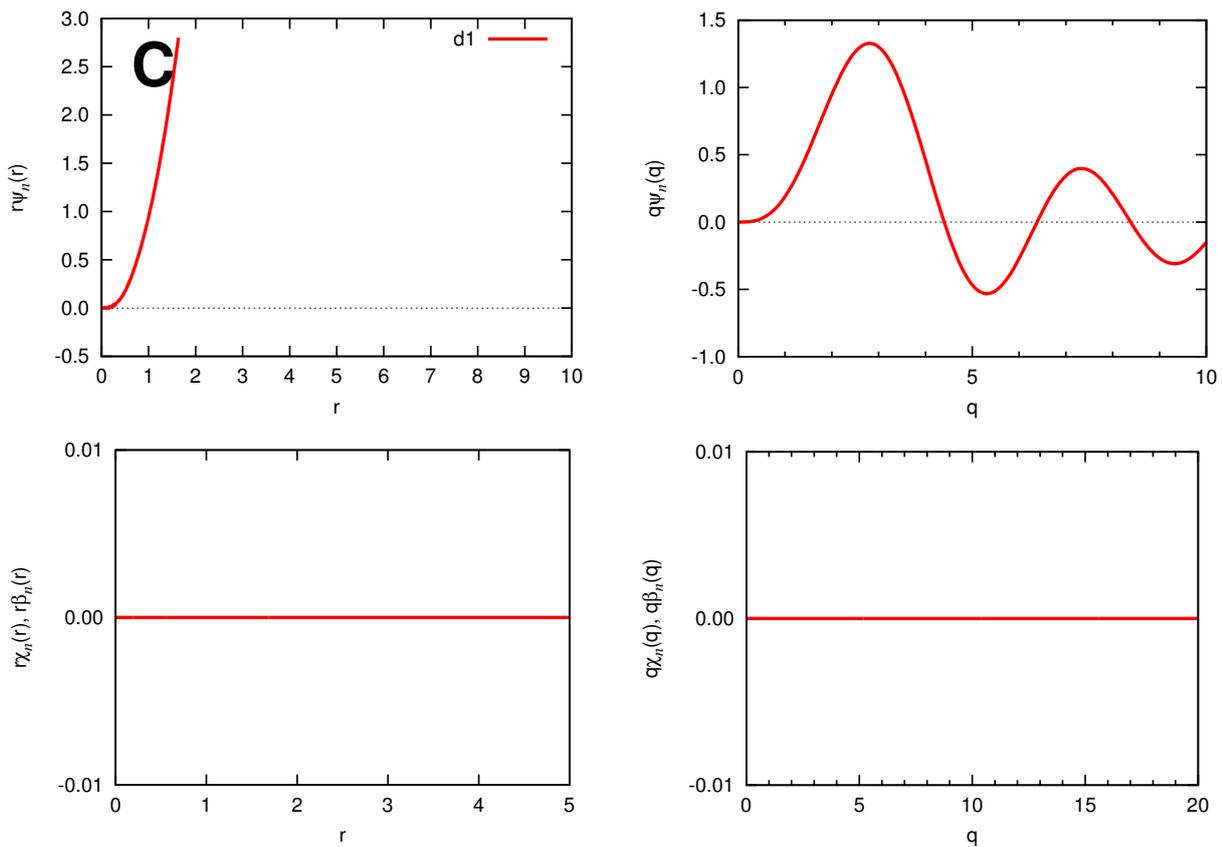


図 10: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.6): d 軌道波動関数 (左上), d 軌道波動関数の Fourier 変換 (右上), d 軌道射影関数 (左下), d 軌道射影関数の Fourier 変換 (右下) を表示しています。今の場合, d 軌道は非束縛なので左上図のように波動関数は途中までしか計算されていません。そのため, 右上図の Fourier 変換は意味の無いものになります。また, d 軌道を局所ポテンシャルにしているため左下図と右下図の射影関数はゼロになります。

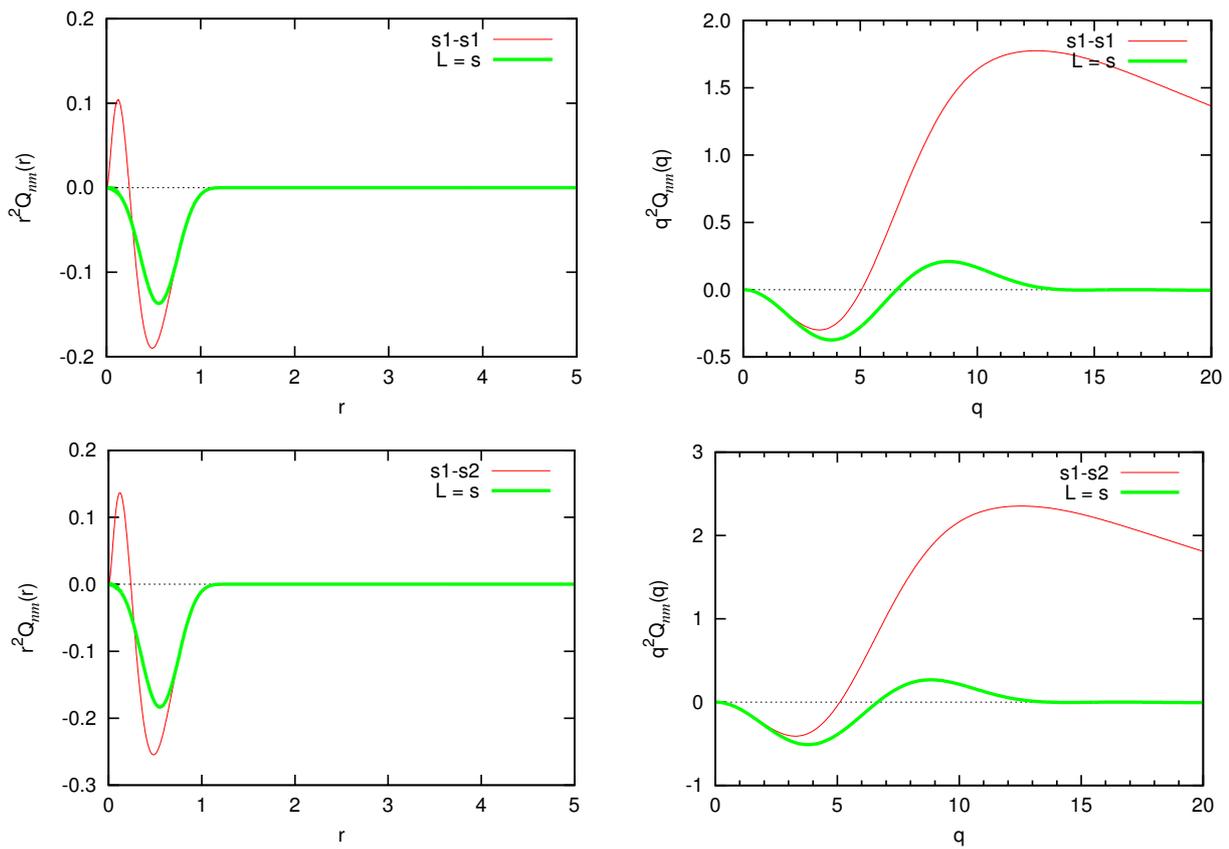


図 11: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.7): デフィシット電荷密度関数 (左) とその Fourier 変換 (右) を表示しています。赤線が全電子デフィシット電荷密度, 緑線が擬デフィシット電荷密度です。緑線の Fourier 変換がゼロとなるところが電荷のカットオフエネルギーの目安となります。

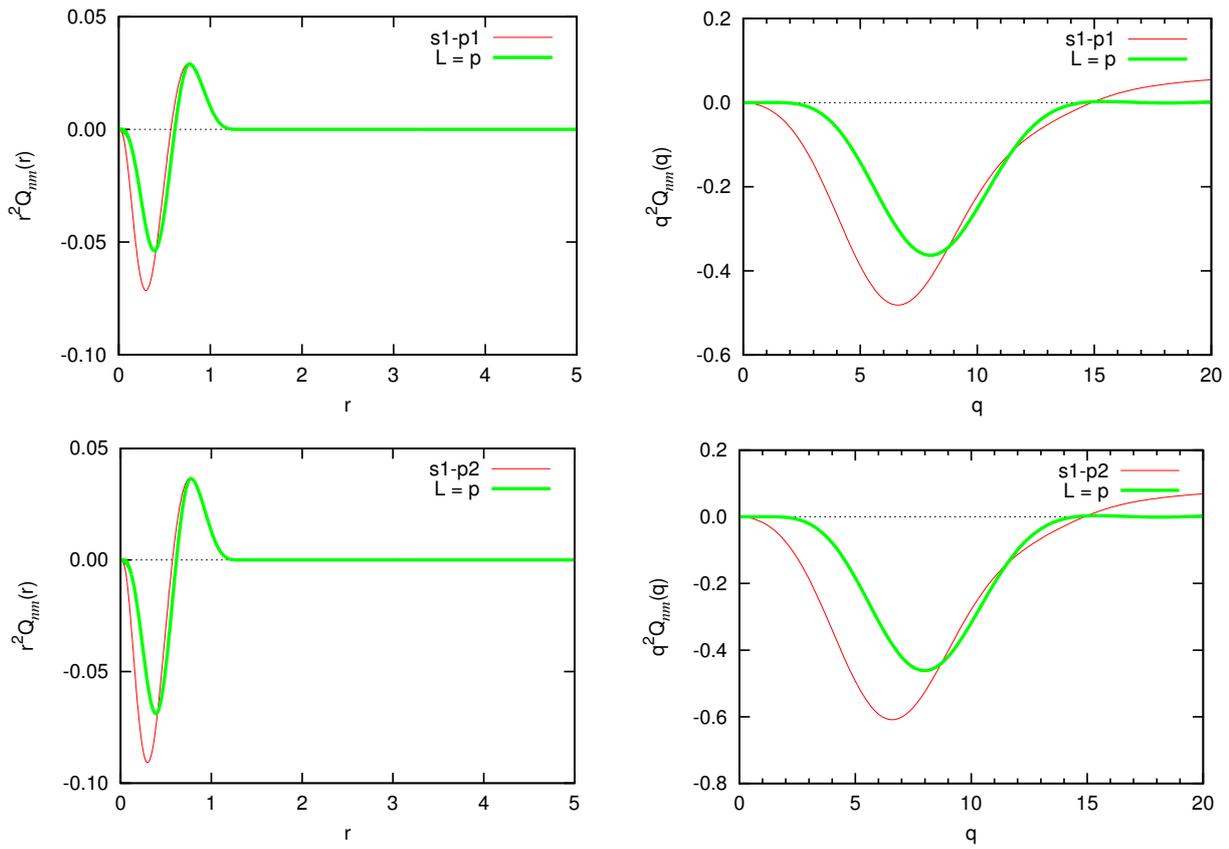


図 12: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.8): デフィント電荷密度関数 (左) とその Fourier 変換 (右) を表示しています。赤線が全電子デフィント電荷密度, 緑線が擬デフィント電荷密度です。緑線の Fourier 変換がゼロとなる場所が電荷のカットオフエネルギーの目安となります。

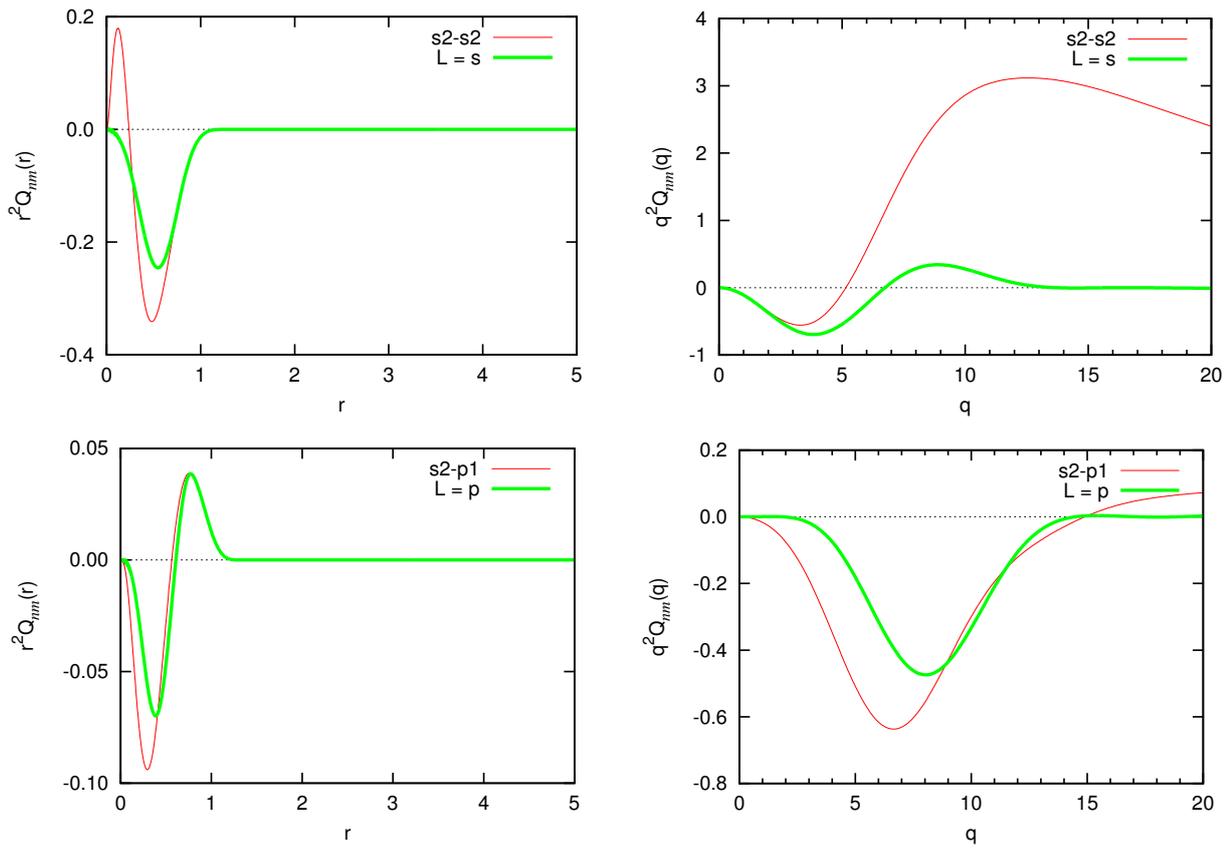


図 13: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.9): デフィント電荷密度関数 (左) とその Fourier 変換 (右) を表示しています。赤線が全電子デフィント電荷密度, 緑線が擬デフィント電荷密度です。緑線の Fourier 変換がゼロとなるところが電荷のカットオフエネルギーの目安となります。

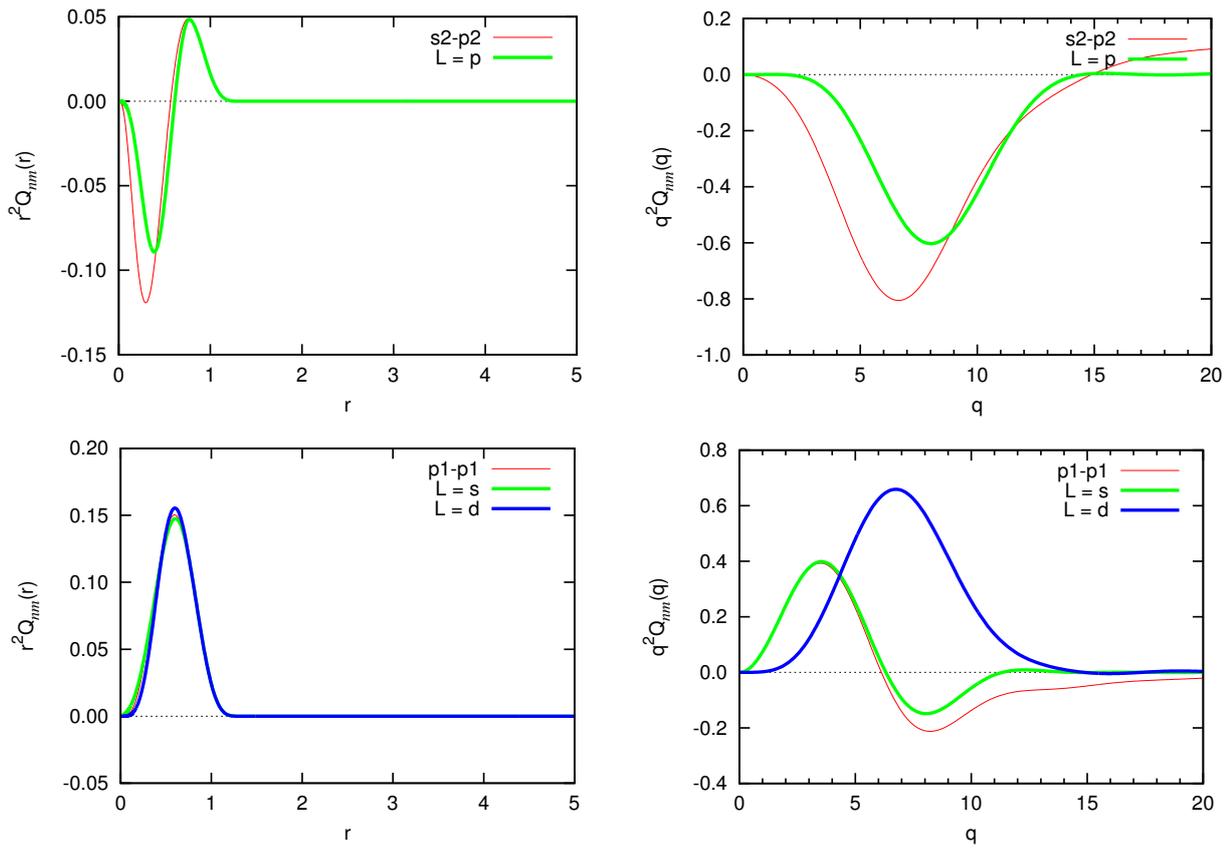


図 14: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.10): デフィシト電荷密度関数 (左) とその Fourier 変換 (右) を表示しています。赤線が全電子デフィシト電荷密度, 緑線が擬デフィシト電荷密度です。緑線の Fourier 変換がゼロとなるところが電荷のカットオフエネルギーの目安となります。

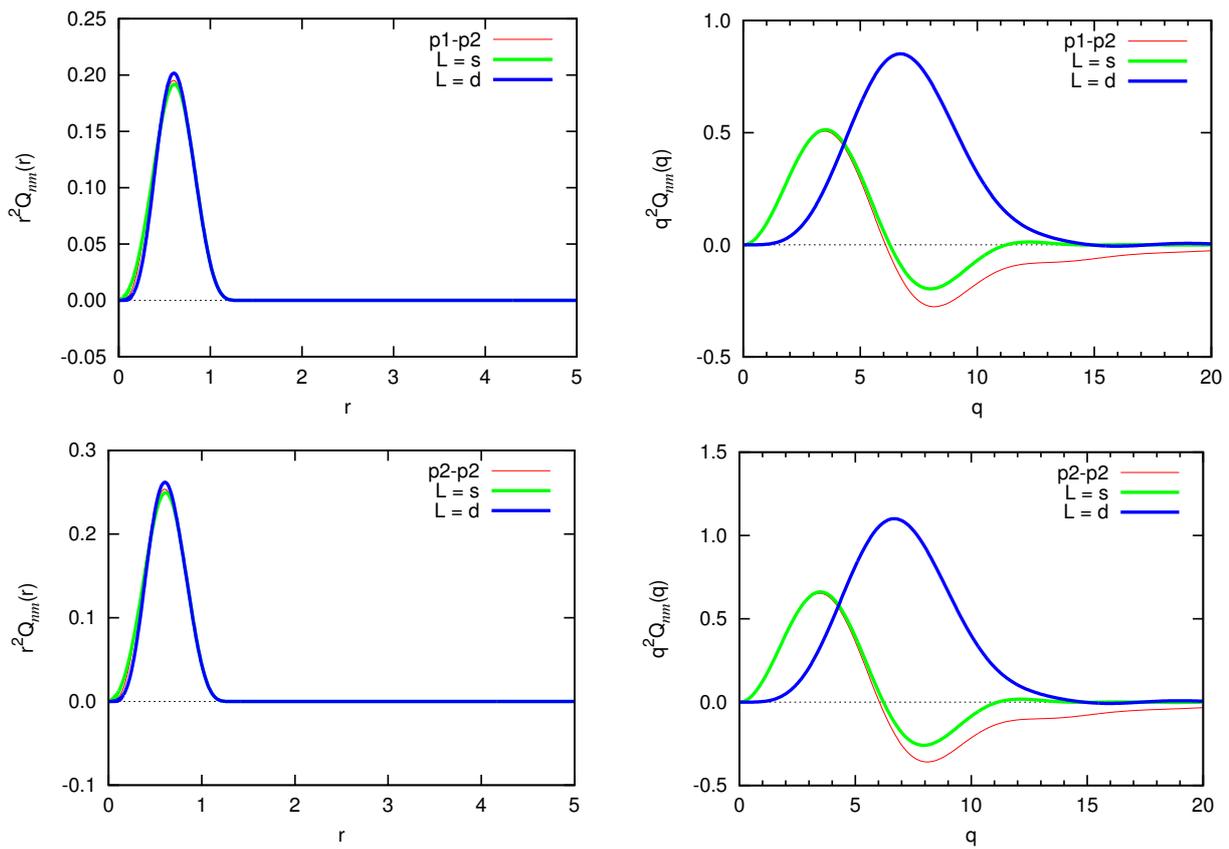


図 15: 炭素原子のウルトラソフト擬ポテンシャル (p.11): デフィシット電荷密度関数 (左) とその Fourier 変換 (右) を表示しています。赤線が全電子デフィシット電荷密度, 緑線が擬デフィシット電荷密度です。緑線の Fourier 変換がゼロとなるところが電荷のカットオフエネルギーの目安となります。

ウルトラソフトの場合も同様に CIAOPP 形式のデータを表示することができます。次のコマンドを入力してみてください。

```
% ../../../../tools/makefig_ciaopp.pl test_06_C_lda_us
```

あるいは

```
% ../../../../tools/makefig_ciaopp.pl test_06_C_lda_us -f
```

その結果、次のファイルが出力されます。

ciaopp_test_06_C_lda_us.pdf	ciaopp_test_06_C_lda_us_rbeta.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_gbeta.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rho.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_p1p1.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rphi.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_p1p2.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_p1p1.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_p2p2.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_p1p2.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_s1p1.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_p2p2.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_s1p2.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_s1p1.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_s1s1.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_s1p2.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_s1s2.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_s1s1.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_s2p1.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_s1s2.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_s2p2.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_s2p1.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ggq_s2s2.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_s2p2.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_gphi.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_rrq_s2s2.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ldr.eps	ciaopp_test_06_C_lda_us_vloc.eps
ciaopp_test_06_C_lda_us_ldr_std.eps	

このうち、“ciaopp_test_06_C_lda_us.pdf” にすべてのグラフがまとめられていますのでご覧になってください。“test_06_C_lda_us_fig.pdf” ほどの情報はありませんが、対数微分や Fourier 変換など十分な情報が表示されていることがわかると思います。

5 おわりに

この「Tutorial」では、水素原子と炭素原子に対する典型的な計算例を示すことで、「CIAO」の基本的な使い方を説明しました。詳しくは「User's Manual」を参照してください。