

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

PPCONV バージョン 1.0

ユーザマニュアル

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

目次

1	はじめに	1
1.1	機能	1
1.2	動作環境	1
1.3	インストールとコンパイル	1
2	使用方法	2
3	ファイルフォーマット	3
3.1	CIAO 形式	3
3.1.1	識別子と変数の説明	4
3.1.2	CIAO 形式の入力ファイル例	5
3.2	GNCPP 形式	7
3.2.1	変数の説明	7
3.2.2	GNCPP 形式の入力ファイル例	8
3.3	PSV 形式	9
3.3.1	変数の説明	9
3.3.2	PSV 形式の入力ファイル例	10
4	変数の対応	12

表 目 次

1	入力変数の対応とデフォルト値	12
1	入力変数の対応とデフォルト値 (続き)	13

1 はじめに

1.1 機能

本プログラムは、CIAO 形式 (標準)、GNCPP 形式、PSV 形式の擬ポテンシャル作成用入力ファイルを相互に変換します。変換ログをログファイル ppconv.log に出力します。

1.2 動作環境

OS : Linux、UNIX
コンパイラ : C コンパイラ (cc、gcc など)

1.3 インストールとコンパイル

ppconv10.tar.gz を解凍します。

```
% gzip -d ppconv10.tar.gz  
% tar xvf ppconv.tar
```

ppconv10 ディレクトリに次の 4 つのファイルが存在することを確認してください。

```
README  
Makefile  
ppconv10.c  
ppconv.h
```

ppconv10 ディレクトリで make により実効ファイル ppconv を作成します。

```
% cd ppconv10  
% make
```

実効ファイル ppconv が作成されていることを確認してください。

2 使用方法

type1 形式のファイル *file1* を *type2* 形式のファイル *file2* に変換するには、

```
ppconv [type1:]file1 [type2:]file2
```

とします。*type1*、*type2* は CIAO:、GNCPP:、PSV: または PSVPP: のいずれかです。大文字と小文字は区別しません。ファイル名の拡張子が .ciao、.gncpp、.psv または .psvpp のときは *type1*、*type2* を省略しても対応するファイル形式であると解釈されます。ファイル拡張子が .ciao、.gncpp、.psv または .psvpp のいずれでもなく、*type*: の記述もない場合は CIAO 形式のファイルと解釈されます。

変換元ファイル、変換先ファイルを指定せずに、次のオプションを指定することができます。

- i, -interactive ファイルの変換を対話型で行います。
- h, -help ppconv コマンドの使用方法を表示します。

3 ファイルフォーマット

3.1 CIAO 形式

識別子を太字、変数を斜体字で示します。

```

atom{atom_var}{
  all_electron{
    title{title_var}
    spin{spin_var1, spin_var2}
    ks_equation{ks_var1}
    configuration{
      {conf_var1, conf_var2, conf_var3}
      .
      .
    }
    core_potential{cp_var}
    xc_potential{xc_var}
    rmesh{rmesh_var}{rmesh_var1, rmesh_var2, rmesh_var3}
    mixing{mix{mix_var} anderson{anderson_var}}
    convergence{
      scf{energy{conv_scf_e_var} potential{conv_scf_p_var} max_iteration{conv_scf_maxit_var}}
      wf{conv_wf_var}
    }
    output{
      rho{out_rho_var}
      rm{out_rm_var}
    }
    predictor_corrector{pc_var1, pc_var2}
    diff_order{diff_var}
    num_coeff_veff{veff_var}
  }
  pseudopotential{ps_var}{
    wf{
      s{wf_var1}{wf_var2}{rcut{wf_rcut_var1, wf_rcut_var2}}
      p{wf_var1}{wf_var2}{rcut{wf_rcut_var1, wf_rcut_var2}}
      d{wf_var1}{wf_var2}{rcut{wf_rcut_var1, wf_rcut_var2}}
      f{wf_var1}{wf_var2}{rcut{wf_rcut_var1, wf_rcut_var2}}
      nc{shape{nc_shape_var1}{nc_shape_var2}}
      us{shape{us_shape_var1}{nc_shape_var2}}
      gmesh{wf_gmesh_var}{wf_gmesh_var1, wf_gmesh_var2, wf_gmesh_var3}
    }
    local{local_var1}{local_var2}
    qps{
      rcut{qps_il1, qps_t1, qps_il2, qps_t2, qps_il3}{qps_rc}
      .
      .
      .
      shape{qps_shape_var1}{qps_shape_var2}
      gmesh{qps_gmesh_var}{qps_gmesh_var1, qps_gmesh_var2, qps_gmesh_var3}
    }
    core_correction{cc_var}{
      rcut{cc_rcut_var1}{cc_rcut_var2}
      shape{cc_shape_var1}{cc_shape_var2}
      gmesh{cc_gmesh_var}{cc_gmesh_var1, cc_gmesh_var2, cc_gmesh_var3}
    }
    fourier_transform{ft_var}{
      gmesh{ft_gmesh_var}{ft_gmesh_var1, ft_gmesh_var2, ft_gmesh_var3}
    }
    logarithmic_derivative{ld_var}{
      emesh{ld_emesh_var}{ld_emesh_var1, ld_emesh_var2, ld_emesh_var3}
      rcut{ld_rcut_var}
    }
    output{
      pp{out_pp_var}
      ft{out_ft_var}
      logderi{out_ld_var}
    }
  }
  debug{debug_var}
}

```

3.1.1 識別子と変数の説明

() 内は変数の型または選択肢。選択肢は"" 中の文字列を書きます。識別子を記述する順序は入れ替えることができます。変数の値として"NO"または"NONE"を選択できる識別子は省略することができ、省略した場合"NO"または"NONE"を選択した場合と同様に解釈されます。コメントは/*と*/の中に入れます。コメントは入れ子にすることはできません。

atom {}	全てのパラメーターの記述
<i>atom_var</i>	原子番号 (integer)
all_electron {}	全電子計算のパラメーターの記述
title {}	タイトルの記述
<i>title_var</i>	タイトル (string)
spin {}	スピン分極の記述
<i>spin_var1</i>	分極の有無 (分極無:"RESTRICTED", 分極有:"POLARIZED")
<i>spin_var2</i>	up スピンと down スピンの差 (real)
ks_equation {}	相対論効果の記述
<i>ks_var1</i>	相対論効果 (無し:"NONREL", スカラー相対論:"SREL", 相対論:"REL", GNCPP 特有スカラー相対論:"SREL_GNCPP")
configuration {}	電子配置の記述
<i>conf_var1</i>	軌道 (string, ex. "1s", "2p")
<i>conf_var2</i>	電子数。スピン分極がある場合は up スピン数 (real)
<i>conf_var3</i>	スピン分極がある場合は down スピン数。分極無しの場合、無視または省略可。 (real)
core_potential {}	コアポテンシャルの記述
<i>cp_var</i>	コアポテンシャル (通常:"NORMAL", 擬原子:"PATOM")
xc_potential {}	交換相関ポテンシャルの記述
<i>xc_var</i>	交換相関ポテンシャル ("LDAPZ81", "LDAPW92", "GGAPBE96", "GGAREVPBE")
rmesh {},,	動径メッシュの記述
<i>rmesh_var</i>	指定または自動 ("MANUAL", "AUTOMATIC")
<i>rmesh_var1</i>	刻み数 (integer)
<i>rmesh_var2</i>	最小値 (real)
<i>rmesh_var3</i>	最大値 (real)
mixing {}	電荷の mixing の記述
mix {}	電荷の mixing 量の記述
<i>mix_var</i>	電荷の mixing 量 (real)
anderson {}	アンダーソン法の記述
<i>anderson_var</i>	mix するステップ数
convergence {}	収束に関する記述
scf {}	SCF の収束判定の記述
energy {}	全エネルギーの収束判定の記述
<i>conv_scf_e_var</i>	全エネルギーの許容誤差 (real)
potential {}	ポテンシャルの収束判定の記述
<i>conv_scf_p_var</i>	ポテンシャルの許容誤差 (real)
max_iteration {}	SCF の繰り返し数の記述
<i>conv_scf_maxit_var</i>	最大繰り返し数
wf {}	波動関数の収束判定の記述
<i>conv_wf_var</i>	波動関数の許容誤差 (real)
output {}	全電子計算のファイル出力に関する記述
rho {}	電荷のファイル出力に関する記述
<i>out_rho_var</i>	電荷の出力ファイル形式 ("NONE", "IGOR", "GNUPLOT")
rm {}	波動関数が最大となる半径のファイル出力に関する記述
<i>out_rm_var</i>	波動関数が最大となる半径の出力ファイル形式 ("NONE", "IGOR", "GNUPLOT")
predictor_corrector {},	予測子-修正子法に関する記述
<i>pc_var1</i>	予測子-修正子法の次数 (integer)
<i>pc_var2</i>	遡るステップ数 (integer)
diff_order {}	微分の最大次数の記述
<i>diff_var</i>	微分の最大次数 (integer)
num_coeff_veff {}	有効ポテンシャルの係数の記述
<i>veff_var</i>	有効ポテンシャルの係数の数 (integer)
pseudopotential {},,	擬ポテンシャル計算のパラメーターの記述
<i>ps_var</i>	擬ポテンシャル計算の実行の有無 ("YES", "NO")
wf {}	波動関数に関する記述
s {},,	s 軌道の記述
p {},,	p 軌道の記述。不要の場合省略可
d {},,	d 軌道の記述。不要の場合省略可
f {},,	f 軌道の記述。不要の場合省略可
<i>wf_var1</i>	最外殻の s 軌道 (String, ex. "3s")
<i>wf_var2</i>	擬ポテンシャルのタイプ (ノルム保存型:"NC", ウルトラソフト型:"US")
rcut {}	カットオフの記述
<i>wf_rcut_var1</i>	カットオフ半径 (real)
<i>wf_rcut_var2</i>	E_T (real)
nc {}	ノルム保存擬ポテンシャルの記述
shape {},,	ノルム保存擬ポテンシャルのタイプの記述
<i>nc_shape_var1</i>	ノルム保存擬ポテンシャルのタイプ ("TM90", "KERKER85")
<i>nc_shape_var2</i>	項の数 (integer, 1 に固定)
us {}	ウルトラソフト擬ポテンシャルの記述
shape {},,	ウルトラソフト擬ポテンシャルのタイプの記述
<i>us_shape_var1</i>	ウルトラソフト擬ポテンシャルのタイプ ("POLYNOMIAL" に固定)
<i>nc_shape_var2</i>	項数 (integer)

gmesh {{}}	逆空間メッシュの記述
<i>wf_gmesh_var</i>	指定または自動 ("MANUAL", "AUTOMATIC")
<i>wf_gmesh_var1</i>	刻み数 (integer)
<i>wf_gmesh_var2</i>	最小値 (real)
<i>wf_gmesh_var3</i>	最大値 (real)
local {{}}	局在の記述
<i>local_var1</i>	手法 ("ORBITAL", "GNCP", "PSV")
<i>local_var2</i>	軌道 (string, ex. "d")
qps {{}}	pseudize の記述
rcut {{,,}}	カットオフの記述
<i>qps_il1</i>	IL1 (integer)
<i>qps_t1</i>	T1 (integer)
<i>qps_il2</i>	IL2 (integer)
<i>qps_t2</i>	T2 (integer)
<i>qps_il3</i>	IL3 (integer)
<i>qps_rc</i>	カットオフ半径 (real)
shape {{}}	展開関数の記述
<i>qps_shape_var1</i>	展開関数 ("POLYNOMIAL", "SBESSEL")
<i>qps_shape_var2</i>	項数 (integer)
gmesh {{,,}}	逆空間メッシュの記述
<i>qps_gmesh_var</i>	指定または自動 ("MANUAL", "AUTOMATIC")
<i>qps_gmesh_var1</i>	刻み数 (integer)
<i>qps_gmesh_var2</i>	最小値 (real)
<i>qps_gmesh_var3</i>	最大値 (real)
core_correction {{}}	コア補正の記述
<i>cc_var</i>	コア補正のタイプ (無し:"NONE", 部分コア補正:"PCC", 全コア補正:"FCC")
rcut {{}}	カットオフの記述
<i>cc_rcut_var1</i>	カットオフの決め方 (自動:"AUTOMATIC", 半径:"RADIUS", 内殻と外殻の電荷の比:"CV_RATIO")
<i>cc_rcut_var2</i>	半径または電荷の比 (real)
shape {{}}	展開関数の記述
<i>cc_shape_var1</i>	展開関数 ("POLYNOMIAL", "SBESSEL")
<i>cc_shape_var2</i>	項数 (integer)
gmesh {{,,}}	逆空間メッシュの記述
<i>cc_gmesh_var</i>	指定または自動 ("MANUAL", "AUTOMATIC")
<i>cc_gmesh_var1</i>	刻み数 (integer)
<i>cc_gmesh_var2</i>	最小値 (real)
<i>cc_gmesh_var3</i>	最大値 (real)
fourier_transform {{}}	フーリエ変換に関する記述
<i>ft_var</i>	フーリエ変換の実行の有無 ("YES", "NO")
gmesh {{,,}}	逆空間メッシュの記述
<i>ft_gmesh_var</i>	指定または自動 ("MANUAL", "AUTOMATIC")
<i>ft_gmesh_var1</i>	刻み数 (integer)
<i>ft_gmesh_var2</i>	最小値 (real)
<i>ft_gmesh_var3</i>	最大値 (real)
logarithmic_derivative {{}}	対数微分に関する記述
<i>ld_var</i>	対数微分の実行の有無 ("YES", "NO")
emesh {{,,}}	エネルギーメッシュの記述
<i>ld_emesh_var</i>	指定または自動 ("MANUAL", "AUTOMATIC")
<i>ld_emesh_var1</i>	刻み数 (integer)
<i>ld_emesh_var2</i>	最小値 (real)
<i>ld_emesh_var3</i>	最大値 (real)
rcut {{}}	カットオフの記述
<i>ld_rcut_var</i>	カットオフ半径 (real)
output {{}}	擬ポテンシャル計算のファイル出力に関する記述
pp {{}}	擬ポテンシャルのファイル出力に関する記述
<i>out_pp_var</i>	擬ポテンシャルのファイルタイプ ("NONE", "GNCP", "PSV", "PPOT")
ft {{}}	フーリエ変換のファイル出力に関する記述
<i>out_ft_var</i>	フーリエ変換の出力ファイル形式 ("NONE", "IGOR", "GNUPLOT")
logderi {{}}	対数微分のファイル出力に関する記述
<i>out_ld_var</i>	対数微分の出力ファイル形式 ("NONE", "IGOR", "GNUPLOT")
debug {{}}	ログファイル出力に関する記述
<i>debug_var</i>	ログファイル出力の有無 ("YES", "NO")

3.1.2 CIAO 形式の入力ファイル例

```
atom{14}{
  all_electron{
    title{atom_14_ggapbe96_srel}
    spin{restricted, 0.000000}
    ks_equation{srel}
    configuration{
      {1s, 2.000000, 0.000000}
      {2s, 2.000000, 0.000000}
      {2p, 6.000000, 0.000000}
    }
  }
}
```



```

        {3s, 2.000000, 0.000000}
        {3p, 2.000000, 0.000000}
        {3d, 0.000000, 0.000000}
    }
    core_potential{normal}
    xc_potential{ggapbe96}
    rmesh{manual}{1000, 1.000000d-006, 6.000000d+001}
    mixing{mix}{0.300000}
    convergence{
        scf{energy{1.000000d-008} potential{1.000000d-007} max_iteration{150}}
        wf{1.000000d-010}
    }
    output{
        rho{igor}
        rm{igor}
    }
    predictor_corrector{5, 3}
    diff_order{4}
    num.coeff_veff{5}
}
pseudopotential{yes}{
    wf{
        s{3s}{nc}{rcut{1.700000, 0.000000}}
        p{3p}{us}{rcut{1.800000, 0.000000} rcut{1.800000, -0.500000}}
        d{3d}{nc}{rcut{2.000000, 0.000000}}
        nc{shape{tm90}}{1}
        us{shape{polynomial}}{10}
        gmesh{manual}{501, 0.000000, 5.000000}
    }
    local{orbital}{d}
    qps{
        rcut{0, 1, 1, 1, 1}{1.000000}
        rcut{0, 1, 1, 2, 1}{1.000000}
        rcut{1, 1, 1, 1, 0}{1.000000}
        rcut{1, 1, 1, 1, 2}{1.000000}
        rcut{1, 1, 1, 2, 0}{1.000000}
        rcut{1, 1, 1, 2, 2}{1.000000}
        rcut{1, 2, 1, 2, 0}{1.000000}
        rcut{1, 2, 1, 2, 2}{1.000000}
        shape{polynomial}{10}
        gmesh{manual}{1001, 0.000000, 18.000000}
    }
    core_correction{pcc}{
        rcut{radius}{0.700000}
        shape{polynomial}{10}
        gmesh{manual}{1001, 0.000000, 18.000000}
    }
    fourier_transform{yes}{
        gmesh{manual}{301, 0.050000, 15.000000}
    }
    logarithmic_derivative{yes}{
        emesh{manual}{601, -2.000000, 1.000000}
        rcut{0.000000}
    }
    output{
        pp{gncpp}
        ft{igor}
        logderi{igor}
    }
}
debug{no}
}

```

3.2 GNCP形式

MESH	XH	RMAX	RINF				
PMIX	EDEL	VDEL					
JPRT	JRH	IFP	NSHL	IRELA			
XC							
NATOM	XION						
NLJC	WNLJ	DOWN					
.							
.							
.							
_____*							
LPSMAX	ILOC	IVAN					
LPLUS1	ITAU	INANL					
NORB	R.CL	ETAU					
.							
.							
.							
GMAXWF	MESHGW	MOPSW					
GMAXPS	MESHGS	MOPSC					
IL1	T1	IL2	T2	IL3	RCMLT	IL4	
.							
.							
IPCC							
CRCO							
GMAXPC	MESHGC	MOPCC					

3.2.1 変数の説明

MESH	動径メッシュの刻み数 (integer)
XH	$R_i = R_{max} \exp\{(i - MESH)/XH\}$ (real)
RMAX	動径メッシュの最大値 (real)
RINF	無限遠と見なす距離 (real)
PMIX	電荷の mixing パラメーター (real)
EDEL	全エネルギーの収束判定誤差 (real)
VDEL	ポテンシャルの収束判定誤差 (real)
JPRT	デバッグフラグ (1 に固定)
JRH	初期電荷密度の与え方 (0 に固定)
IFP	スピン分極の有無 (分極無:0, 分極有:1)
NSHL	シェルの数 (integer)
IRELA	相対論効果 (スカラー相対論:1, スカラー相対論 (外殻の小コンポーネント無視):2)
XC	交換相関ポテンシャル ("WIGN", "BH", "GL", "MJW", "PZ", "LDAPW91", "GGAPW91", "GGABP")
NATOM	原子番号 (integer)
XION	イオン価 (real)
NLJC	3 桁目:主量子数, 2 桁目:方位量子数, 1 桁目:(コア:0, 外殻占有:5, 外殻非占有:6)
WNLJ	占有電子数。スピン分極がある場合は up スピン数 (real)
DOWN	スピン分極が有る場合は down スピン数。分極無しの場合は無視。 (real)
LPSMAX	考慮する最大方位量子数+1 (integer)
ILOC	局在軌道の方位量子数+1 (integer)
IVAN	全てノルム保存型の場合:0, ウルトラスフト型を使用:1
LPLUS1	方位量子数+1 (integer)
ITAU	τ の数 (integer)
IVANL	ノルム保存型:0, ウルトラスフト型:1
NORB	NLJC リスト中の何番目の軌道か。 (integer)
R.CL	波動関数のカットオフ半径 (real)
ETAU	E_τ (real)
GMAXWF	波動関数の逆空間メッシュの最大値 (real)
MESHGW	波動関数の逆空間メッシュの刻み数 (integer)
MOPSW	波動関数の展開関数の項の最大次数 (integer)
GMAXPS	Q_{nm} の逆空間メッシュの最大値 (real)
MESHGS	Q_{nm} の逆空間メッシュの刻み数 (integer)
MOPSC	Q_{nm} の展開関数の項の最大次数 (integer)
IL1	$l1$ (integer)
T1	$\tau1$ (integer)
IL2	$l2$ (integer)
T2	$\tau2$ (integer)
IL3	$l3$ (integer)
RCMLT	pseudize のカットオフ半径 (real)
IL4	最終行:0, 継続行:1
IPCC	コア補正のタイプ (無し:0, 部分コア補正:1, 全コア補正:2)
CRCO	コア補正のカットオフ値 (正のとき内殻と外殻の電荷の比が CRC0 となる半径、負の時 CRCO が半径の値)

GMAXPC	コア補正の逆空間メッシュの最大値 (real)
MESHGC	コア補正の逆空間メッシュの刻み数 (integer)
MOPCC	波動関数の展開関数の項の最大次数 (integer)

3.2.2 GNCP形式の入力ファイル例

```

1000      55.779346      60.000000      200.00 : MESH, XH, RMAX, RINF
0.300000      1.D-8      1.D-7      : PMIX, EDEL, VDEL
1      0      0      6      1      : JPRT, JRH, IFP, NSHL
ggapbe      : PZ, LDAPW91, GGAPW91, GGABP
14      : NATOM, XION
100      2.000000      0.000000
200      2.000000      0.000000
210      6.000000      0.000000
305      2.000000      0.000000
315      2.000000      0.000000
326      0.000000      0.000000
*-----*-----*
3      3      1      : LPSMAX, ILOC, IVAN
1      1      0      : l+1, itau, ivanl
1      4      1.700000      0.000000      : norb, r\_cl, etau
2      2      1      : l+1, itau, ivanl
5      1.800000      0.000000      : norb, r\_cl, etau
5      1.800000      -0.500000      : norb, r\_cl, etau
3      1      0      : l+1, itau, ivanl
6      2.000000      0.000000      : norb, r\_cl, etau
5.000000      501      9      : GMAXWF, MESHGW, MOPSW
18.000000      1001      9      : GMAXPS, MESHGS, MOPSC
1      2      2      2      2      1.000000      1
1      2      2      3      2      1.000000      1
2      2      2      2      1      1.000000      1
2      2      2      2      3      1.000000      1
2      2      2      3      1      1.000000      1
2      2      2      3      3      1.000000      1
2      3      2      3      1      1.000000      1
2      3      2      3      3      1.000000      0
1      : IPCC
-0.70      : CRCO
18.000000      1001      9      : GMAXPC, MESHGC, MOPCC

```

3.3 PSV 形式

```

BEGIN-ALLEL
title.allel
xctype zn      irela
ncst
nc      lc      occupc ec
.
.
nvstal
nv      lv      occupv ev
.
.
itermx mesh rmin  rmax
conv   beta
END-ALLEL
BEGIN-PSV
title.psv
zv      ipcc    rpcc
nvst
nv      lv      rc      ipot   iwav   nref   eref   ...
.
.
iloc
np      lp      rcp      iwavp
ipq
rin     ...
gc      gh      ng
nsst
ns      ls      swgt
.
.
END-PSV
BEGIN-SOLPS
title.solps
norb
nv      lv      occu   ein
.
.
END-SOLPS
BEGIN-DRV
title.driv
emin   emax   neng
rdrv
END-DRV

```

3.3.1 変数の説明

BEGIN-ALLEL	全電子計算パラメーターの開始
END-ALLEL	全電子計算パラメーターの終了
BEGIN-PSV	擬ポテンシャル計算パラメーターの開始
END-PSV	擬ポテンシャル計算パラメーターの終了
BEGIN-SOLPS	
END-SOLPS	
BEGIN-DRV	対数微分計算パラメーターの開始
END-DRV	対数微分計算パラメーターの終了
BEGIN-COMMENT	コメントの開始
END-COMMENT	コメントの終了

title.allel	全電子計算のタイトル (string)
xctype	交換相関ポテンシャル ("GGAPBE96","GGAPW91","LDAPW92")
zn	原子番号 (integer)
irela	相対論効果 (無し:0, スカラー相対論:1)
ncst	内殻のシェルの数 (integer)
nc	主量子数 (integer)
lc	方位量子数 (integer)
occupc	占有電子数 (real)
ec	軌道の初期エネルギー (real)
nvstal	外殻のシェルの数 (integer)
nv	主量子数 (integer)
lv	方位量子数 (integer)
occupv	占有電子数 (real)
ev	軌道の初期エネルギー (real)
itermx	SCF の最大繰り返し数 (integer)
mesh	動径メッシュの刻み数 (integer)
rmin	動径メッシュの最小値 (real)
rmax	動径メッシュの最大値 (real)
conv	ポテンシャルの収束判定誤差 (real)

beta	電荷の mixing パラメーター (real)
title.psv	擬ポテンシャル計算のタイトル (string)
zv	外殻電子数 (integer)
ipcc	コア補正のタイプ (無し:0, 部分コア補正:1)
rpcc	コア補正のカットオフ半径 (real)
nvst	考慮する軌道数 (integer)
nv	主量子数 (integer)
lv	方位量子数 (integer)
rc	波動関数のカットオフ半径 (real)
ipot	ノルム保存型:1, ウルトラソフト型:0
iwav	ipot=1 のとき Troullier-Martin 型:0,Kerker 型:1
nref	τ の数 (integer)
eref	E_r 。nref の数だけ並べる。 (real)
iloc	局在軌道 (最外殻軌道:0 (nvst=0:s, 1:p, 2:d))
np	主量子数 (integer)
lp	方位量子数 (integer)
rcp	カットオフ半径 (real)
iwavp	0 に固定
ipq	pseudize (しない (ノルム保存型のとき):0, する:1)
rin	pseudize のカットオフ半径 対称性を考慮して異なる $l1, \tau1, l2, \tau2, l3$ の組の数だけ並べる (real)
gc	Q_{nm} の逆空間メッシュの最小値 (real)
gh	Q_{nm} の逆空間メッシュの刻み幅 (real)
ng	Q_{nm} の逆空間メッシュの刻み数 (integer)
nsst	外殻のシェルの数 (integer)
ns	主量子数 (integer)
ls	方位量子数 (integer)
swgt	占有電子数 (real)
title.solps	SOLPS のタイトル
norb	外殻のシェルの数 (integer)
nv	主量子数 (integer)
lv	方位量子数 (integer)
occu	占有電子数 (real)
ein	軌道の初期エネルギー (real)
title.drv	対数微分計算のタイトル
emin	対数微分メッシュの最小値 (real)
emax	対数微分メッシュの最大値 (real)
neng	対数微分メッシュの刻み数 (integer)
rdrv	対数微分のカットオフ半径 (real)

3.3.2 PSV 形式の入力ファイル例

```

BEGIN-ALLEL
si -- PBE, non-relativistic
GGAPBE96      14.0      1          # xtype zn irela
3              # ncst
1      0      2.0      -65.0        # nc lc occupc ec
2      0      2.0      -5.0         # nc lc occupc ec
2      1      6.0      -3.5         # nc lc occupc ec
2              # nvstal
3      0      2.0      -0.4          # nv lv occupv ev
3      1      2.0      -0.2          # nv lv occupv ev
100    1501    9.8242627835d-06    60.d0 # itermx mesh rad(1) rad(mesh)
1.d-16    0.1          # [conv beta]
END-ALLEL
BEGIN-PSV
si -- PBE, non-relativistic
4.0      0      2.0          # zv ipcc rpcc
2              # nvst
3      0      1.6      1      0      2      0.0      -0.23289934 # nv lv rc ipot iwav nref eref...
3      1      1.9      1      0      2      0.0      -0.14084668 # nv lv rc ipot iwav nref eref...
0              # iloc
3      1      1.6      0          # np lp rcp iwavp
0              # ipq
1.6      1.9      2.0          # rin...
3.5      0.1      399          # gc gh ng
2              # nsst
3      0      2.0          # ns ls swgt
3      1      2.0          # ns ls swgt
END-PSV
BEGIN-SOLPS
si -- PBE, non-relativistic
2              # norb
3      0      2.0      -0.4        # nv lv occu ein
3      1      2.0      -0.2        # nv lv occu ein
END-SOLPS
BEGIN-DRV

```

```
si -- PBE, non-relativistic      # emin emax neng  
-2.0 1.0 100                    # rdrv  
2.7  
END-DRV
```

4 変数の対応

CIAO 形式、GNCPP 形式、PSV 形式の変数の対応を表 1 に示します。また変換元に対応する変数がない場合のデフォルト値を () 内に示します。変換は全て内部的に一旦 CIAO 形式の変数に代入されるので、GNCPP 形式、PSV 形式については CIAO 形式に対応する変数がない場合に () 内にデフォルト値を示します。対応する変数が空欄でデフォルト値が示されていないものは、他の変数から計算を経て与えられます。

表 1: 入力変数の対応とデフォルト値

CIAO(default)	GNCPP(default)	PSV(default)	意味
<i>atom_var</i>	NATOM	zn	原子番号
	XION (0.0)		イオン価
<i>title_var</i>		title.allel	タイトル
<i>spin_var1</i> (restricted)	IFP		分極の有無
<i>spin_var2</i> (0.0)			up スピンと down スピンの差
<i>ks_var1</i>	IRELA	irela	相対論効果
数える	NSHL	ncst nvstal	記述された軌道の数
<i>conf_var1</i>	NLJC	nc lc nv lv	軌道
		ec ($e_0(z/14)^2$) ev ($e_0(z/14)^2$)	軌道の初期エネルギー
<i>conf_var2</i>	WNLJ	occupc occupv	電子数。分極有のとき up スピン数
<i>conf_var3</i>	DOWN		分極有のとき down スピン数
	JRH (0)		初期電荷の与え方
<i>cp_var</i> (normal)			コアポテンシャル
<i>xc_var</i>	XC	xctype	交換相関ポテンシャル
<i>rmesh_var</i> (manual)			指定:0, 自動:1
<i>rmesh_var1</i>	MESH	mesh	動径メッシュの刻み数
	XH		動径メッシュのスケーリング
<i>rmesh_var2</i>		rmin	動径メッシュの最小値
<i>rmesh_var3</i>	RMAX	rmax	動径メッシュの最大値
	RINF (200)		無限遠と見なす距離
<i>mix_var</i>	PMIX	beta	電荷の mixing 量
<i>anderson_var</i> (-1)			アンダーソン法で mix するステップ数
<i>conv_scf_e_var</i> (1.e-8)	EDEL		全エネルギーの収束許容誤差
<i>conv_scf_p_var</i> (1.e-8)	VDEL		ポテンシャルの収束許容誤差
		conv (1.e-16)	PSV の収束判定
<i>conv_scf_maxit_var</i> (150)		itermx	SCF の最大繰り返し数
<i>conv_wf_var</i> (1.e-10)			波動関数の収束許容誤差
<i>pc_var1</i> (5)			予測子-修正子法の次数
<i>pc_var2</i> (3)			遡るステップ数
<i>diff_var</i> (4)			微分の最大次数
<i>veff_var</i> (5)			有効ポテンシャルの係数の数
<i>out_rho_var</i> (igor)			電荷の出力ファイル形式
<i>out_rm_var</i> (igor)			波動関数最大の半径の出力ファイル形式
<i>ps_var</i> (1)			擬ポテンシャル計算の実行の有無
<i>wf_var1</i>	LPLUS1 NORB	nvst nv lv	指定した方位量子数で最外のもの
<i>wf_var2</i>	IVAN IVANL	ipot	擬ポテンシャルのタイプ
<i>wf_rcut_var1</i>	R_CL	rc	カットオフ半径
<i>wf_rcut_var2</i>	ETAU	eref	E_τ
	ITAU	nref	τ の数
<i>nc_shape_var1</i> (TM90)		iwav	ノルム保存擬ポテンシャルのタイプ
<i>nc_shape_var2</i> (1)			項数 (1 に固定)
<i>us_shape_var1</i> (polynomial)			ウルトラソフト擬ポテンシャルのタイプ
<i>us_shape_var2</i>	MOPSW+1		項数
<i>wf_gmesh_var</i> (manual)			指定:0, 自動:1
<i>wf_gmesh_var1</i> (401)	MESHGW		逆空間メッシュの刻み数
<i>wf_gmesh_var2</i> (5.0)	GMAXWF		逆空間メッシュの最小値
<i>wf_gmesh_var3</i> (40.0)			逆空間メッシュの最大値

表 1: 入力変数の対応とデフォルト値 (続き)

CIAO(default)	GNCPP(default)	PSV(default)	意味
<i>local_var1</i>	ILOC	iloc	局在手法
<i>local_var2</i>	ILOC	np lp	局在軌道番号
		rcp	局在のカットオフ
<i>local_rcloc</i>	RCLOC		GNCPP の rcloc
<i>local_const</i>	CONST		GNCPP の const
<i>local_lamda</i>	LAMDA		GNCPP の lamda
		ipq	pseudize 実行の有無
数える	IL4=0 まで	全ての組合せ	pseudize のインデックスの組み合わせ数
<i>qps_il1</i>	IL1	全ての組合せ	pseudize インデックス IL1
<i>qps_t1</i>	T1	全ての組合せ	pseudize インデックス T1
<i>qps_il2</i>	IL2	全ての組合せ	pseudize インデックス IL2
<i>qps_t2</i>	T2	全ての組合せ	pseudize インデックス T2
<i>qps_il3</i>	IL3	全ての組合せ	pseudize インデックス IL3
<i>qps_rc</i>	RCMLT	rin	pseudize のカットオフ半径
<i>qps_shape_var1</i> (polynomial)			展開関数
<i>qps_shape_var2</i> (10)	MOPSC +1		項数
<i>qps_gmesh_var</i> (manual)			指定:0, 自動:1
<i>qps_gmesh_var1</i>	MESHGS	ng	逆空間メッシュの刻み数
		gh	逆空間メッシュの刻み幅
<i>qps_gmesh_var2</i>	GMAXPS	gc	逆空間メッシュの最小値
<i>qps_gmesh_var3</i> (40.0)			逆空間メッシュの最大値
		nsst	外殻のシェルの数
		ns	主量子数
		ls	方位量子数
		swgt	占有電子数
		norb	SOLPS 外殻のシェルの数
		nv	SOLPS 主量子数
		lv	SOLPS 方位量子数
		occu	SOLPS 占有電子数
		ein	SOLPS 軌道の初期エネルギー
<i>cc_var</i>	IPCC	ipcc	コア補正のタイプ
<i>cc_rcut_var1</i>	CRC0 の符号		カットオフの決め方
<i>cc_rcut_var2</i> (2.7)	CRC0	rpcc	半径または電荷の比
<i>cc_shape_var1</i> (polynomial)			展開関数
<i>cc_shape_var2</i> (10)	MOPCC +1		項数
<i>cc_gmesh_var</i> (manual)			指定:0, 自動:1
<i>cc_gmesh_var1</i> (1001)	MESHGC		逆空間メッシュの刻み数
<i>cc_gmesh_var2</i> (12.0)	GMAXPC		逆空間メッシュの最小値
<i>cc_gmesh_var3</i> (40.0)			逆空間メッシュの最大値
<i>ft_var</i> (yes)			フーリエ変換の実行の有無
<i>ft_gmesh_var</i> (manual)			指定:0, 自動:1
<i>ft_gmesh_var1</i> (301)			逆空間メッシュの刻み数
<i>ft_gmesh_var2</i> (0.05)			逆空間メッシュの最小値
<i>ft_gmesh_var3</i> (15.0)			逆空間メッシュの最大値
<i>ld_var</i> (yes)			対数微分の実行の有無
<i>ld_emesh_var</i> (manual)			指定:0, 自動:1
<i>ld_emesh_var1</i> (601)		neng	エネルギーメッシュの刻み数
<i>ld_emesh_var2</i> (-2.0)		emin	エネルギーメッシュの最小値
<i>ld_emesh_var3</i> (1.0)		emax	エネルギーメッシュの最大値
<i>ld_rcut_var</i> (2.7)		rdrv	カットオフ半径
<i>out_pp_var</i> (gncpp)			擬ポテンシャルのファイルタイプ
<i>out_ft_var</i> (igor)			フーリエ変換の出力ファイル形式
<i>out_ld_var</i> (igor)			対数微分の出力ファイル形式
<i>debug_var</i> (no)	JPRT (1)		ログファイル出力の有無