

コンピューテーション・マテリアルズ・デザインワークショップ

CMD[®] Workshop

計算コード・カタログ

Version 2006.06.09.09:44

2012. 5.15 改訂

CMD[®]実行組織編

CMD[®]ワークショップコース紹介

【ビギナー・コース】

内容 ■ 講義：「マテリアルデザインの基礎と応用」

「第一原理計算の基礎」

「結晶の対称性と電子状態」

「マテリアルデザイン先端研究事例」

■ 第一原理計算コードの講義と実習

(M) Machikaneyama2002

(O) Osaka2K

(A) ABCAP

【アドバンスト・コース】

内容 ■ 講義：「マテリアルデザインの基礎と応用」

「マテリアルデザイン先端研究事例」

■ 第一原理計算コードの講義と実習

下記5つのプログラムコードをA群とB群にわけ、それぞれから1つ選択し、期間中に2つのプログラムを集中して実習する。A群とB群の分け方は毎回講師の予定により変更する。

(M) Machikaneyama2002

(R) RSPACE

(H) HiLAPW

(E) ES-OPT

(N) NANIWA-Series

【エキスパート・コース】

内容 ■ 少人数からなるグループで問題解決のための討論・研究（実際のプログラミング及び計算を含む）を行い会期中に、一定の成果を出すことを期待するものです。会場に各自ノートパソコンを持ち込み、計算ファシリティは、参加メンバーの持つ計算機資源を使用します

■ 募集人員：1グループ3人程度で2グループ採用

■ 応募資格：過去のCMD[®]修了生、もしくは、CMD[®]コンソーシアムが、修了生と同等以上と承認したものが、組織する3から5人のグループで応募。グループメンバーは、ワークショップの全日程を受講でき、開催期間中の合宿が可能なこと。応募資格：過去のCMD[®]修了生、もしくは、CMD[®]コンソーシアムが、修了生と同等以上と承認したものが、組織する3から5人のグループで応募。グループメンバーは、ワークショップの全日程を受講でき、開催期間中の合宿が可能なこと。

- 成果の取り扱い：参加CMD[®]ワークショップ講師と参加生の共有とする。ただし、単独に生じたものであると両者が合意したものについては、それぞれ単独の所有とみなす。成果は原則公開とする。支障がある場合は、公開時期および公開内容は別途相談する。なお、事前に参加CMD[®]コンソーシアム講師と参加生は、守秘義務に関する合意契約を結ぶものとする。

【スーパーコンピューター・コース】

内容 ■ 講義：「マテリアルデザインの基礎と応用」

「大規模計算序論」

「SGI Altix の仕様と使い方」

「マテリアルデザイン先端研究事例」

■ 第一原理計算コードの講義と実習

(S) STATE-Senri

コース名の読み替え

【ビギナー・コース】は、「Beginner Course」、「計算機ナノマテリアルデザイン基礎チュートリアル・コース」、若しくは「基礎コース」と表記される場合があります。

【アドバンスト・コース】は、「Advanced Course」、「計算機ナノマテリアルデザイン専門チュートリアル・コース」、若しくは「専門コース」と表記される場合があります。

【エキスパート・コース】は、「Expert Course」、「計算機ナノマテリアルデザイン先端チュートリアル・コース」、若しくは「先端コース」と表記される場合があります。

【スーパーコンピューター・コース】は、「Supercomputer Course」、「計算機ナノマテリアルデザインスーパーコンピューター・コース」、若しくは「スパコンコース」と表記される場合があります。

(M) MACHIKANEYAMA2002 (AkaiKKR)

MACHIKANEYAMA シリーズは、規則系、不規則系、不純物系、部分不規則系、不規則磁気モーメント系などの電子状態をグリーン関数法(KKR 法)によって計算するためのパッケージです。最新のバージョンではフルポテンシャルコードになっておりますが、まだ実習に用いることのできる程度には整備されておきませんので、今回はマフィン・ティン近似によるパッケージを用います。最大の特徴は、普通の規則系を高速で計算できることは勿論、通常のバンド計算が苦手とする、不規則系や不純物系もなんら意識することなくコヒーレントポテンシャル近似(KKR-CPA)によって計算できることです。また、有限温度磁性を考える上で重要になる、不規則局所磁気モーメント状態の計算等もできます。現在、私たちはこのコードを用いてナノスピントロニクス材料の計算機マテリアルデザインを行なっています。このパッケージは公開されています。

実習内容

入力の作り方を実習した後、鉄、ニッケル、コバルトなどの強磁性金属の電子状態を計算します。次にこのような強磁性金属の不規則局所磁気モーメント状態（スピングラスのように、各位置には局所磁気モーメントがあるが、その向きはランダムになっている）の電子状態を計算します。これらの結果から、良く定義された局所磁気モーメントを持つ鉄と、そのような局所磁気モーメントを持たないニッケルの違いを実感します。また、これらの計算から強磁性転移温度を見積もって実験値との比較を行ないます。さらに、典型的な不規則合金としてニッケル・鉄合金の電子状態を計算し、インバー領域で磁気秩序の不安定化が起きることをみます。

アドバンストコースでは上記に加えて簡単なマテリアルデザインを実施します。

開発元

大阪大学グローニンゲン教育研究センター 赤井久純

(N) NANIWA-Series

NANIWA シリーズは、量子ダイナミクス計算のコード体系です。物質は原子からなりますが、その原子の運動をシミュレートする従来の分子動力学法では、まず、何らかの方法（第一原理電子状態計算で電子系のエネルギーを計算し、それをポテンシャルとして、原子の位置座標微分から力を計算する、もしくは原子間に働く 2 体もしくは 3 体の経験的ポテンシャルを仮定して、そこから、同じく力を求める方法等）で、各原子に働く力を計算し、ニュートンの運動方程式、もしくはエネルギー散逸を現象論的に考慮した運動方程式を用いて、古典的に原子の運動を追跡し、系の時間発展を求めるものでした。しかしながら、水素等の軽い元素の関わる反応では、量子力学的効果が、顕著に働くことが示唆されます。このような場合に対処するため開発されたのが、本コード体系です。本コードを用いて、これまで「動的量子フィルタリング効果 (DQF: Dynamical Quantum Filtering)」「振動補助吸着促進効果」「ステアリング効果」「各種反応への分子配向効果 (MSE: Molecular Steric Effect)」「並進運動から回転運動へのエネルギー転移効果」「表面フォノンの反応抑制・促進効果」等を理論的に見出してきました。これらの効果は、現在、国内外の実験グループにより確認され実証されています。現在、NANIWA シリーズでは、7次元のシミュレーションが可能になっています。本 CMD[®]では、2次元までのコード(NANIWA2001B)を公開、使用します。

実習内容

金属表面における水素分子の解離吸着反応をシミュレートします。金属表面としては、活性化障壁のある銅表面および、障壁の無いパラジウムを取り上げ、それぞれの反応過程の特色を理解していただきます。同位体効果の確認、受講生各自が製作した任意のポテンシャルにおける反応確率の計算へ進みます。

時間があれば、更に分子振動を考慮した金属表面での水素分子の解離吸着反応、会合脱離反応、表面散乱等を取り扱います。対象表面は、銅、パラジウム、白金等を予定しています。

開発元

大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻 笠井研究室

(0) Osaka2k

Osaka2k は平面波展開による擬ポテンシャル法電子状態計算プログラムです。基本は、密度汎関数理論に基づいて電子の基底状態をセルフコンシステントに求めるものです。平面波展開法は数学的表現としては非常に簡明であるため、原子間力、ストレスの評価が容易になります。そのおかげで、この方法は構造の最適化、更に動的性質を扱うときに威力を発揮します。特に時間依存を持った分子動力学シミュレーションは他の方法では容易には得られないものです。それを活用して、フォノンの計算、そして熱力学的な計算に威力を発揮しております。この応用として、相図に基礎を置く材料の合成プロセスのデザインを行っております。

高圧での構造探索には研究の最前線のアルゴリズムとのリンクを試みて、新構造物質の探索に使っております。またスピン効果あるいは電子相関関数の自己エネルギー補正などの拡張も進んでおります。このような方法論的な改良は恒常的に追い求めてゆきます。

加えて、他の同種のプログラムと比較して Osaka2k の特徴は、バンド計算、DOS 計算、フェルミ面計算などに、結晶の対称性をフルに活用したサブルーチン集 TSPACE との結合をはかり、対称性に基づく高度な情報を提供できることです。優れた内挿方法に依る DOS 計算は、伝導度などの輸送係数を計算するとき強力な道具を提供します。

実習内容

Beginner Course : 簡単な系での、電子状態計算。構造の最適化。ここでは全員が自分でプログラムを動かす。下記のようなテーマのうち、時間と聴衆の好みにより適当なものを選択する。

- 1) 圧力下での構造最適化
- 2) シリコン中の格子空孔の構造

Advanced Course :

やはり状況により下記のようなテーマから適当に選択する。

- 1) 結晶 Si 中での H の拡散を有限温度でシミュレーションする。
 - 2) 水素結晶の高圧での構造探索
 - 3) 半導体における高圧下での絶縁体—金属転移のシミュレーション
- プログラム実行だけでなく、得られたデータ解析にも重点を置く。

開発元

白井光雲、大阪大学産業科学研究所

ホーム (ユーザー登録によりダウンロードできます)

<http://www.cmp.sanken.osaka-u.ac.jp/~koun/osaka.html>

(A) ABCAP (All Electron Band Structure Calculation Package)

局所密度汎関数理論の局所密度近似 (LDA) を用いて結晶の電子状態を計算します。Kohn-Sham 方程式の解を内殻電子と価電子について求めます。各原子核を中心にマフィンティン球 (MT 球) を設定し、電荷密度、ポテンシャル、波動関数を、MT 球の中では球関数で展開し、MT 球の外では平面波で展開することにより full-potential の計算を実行します。線形化 APW (LAPW) 法として、各角運動量について二つのエネルギーの動径波動関数を用いる Takeda-Kübler の方法を用いています。力を計算することができないので構造最適化やフォノンの計算はできません。LDA+U 法の計算をすることができます。反強磁性体などで LDA では磁気モーメントが出にくい場合、またギャップが開かなかった場合に、LDA+U は有効です。LDA+U 法において導入される電子間相互作用 U_{eff} は、d 電子や f 電子に対して導入され、空いている軌道と詰まっている軌道のエネルギー位置を補正し、バンド構造を改善します。

実習内容

Beginner Course : 単体および簡単な化合物のバンド構造と部分状態密度を計算し、結晶の波動関数がどのような原子波動関数から構成されているか、学習します。

Advanced Course : 遷移金属酸化物の電子状態の計算し、磁気構造によってバンド構造がどのように変わるか、また、Jahn-Teller 歪みによってバンド構造がどのように変わるか、などを学習します。Bloch-Boltzmann 理論に基づく熱起電力の計算や、バンド間遷移による光吸収の計算を適宜選択して行います。

LDA と LDA+U の結果を比べ、+U の効果を確認します。

開発元

東京理科大学工学部物理学科 浜田研究室

(H) HiLAPW2002 (Hiroshima LAPW 2002)

HiLAPW2002 は、局所密度近似の範囲での密度汎関数理論に基づき、全電子フルポテンシャル線形補強平面波 (All-electron Full-potential Linear Augmented Plane Wave) 法により第一原理電子状態計算を実現するためのプログラムで、広島大学第一原理計算グループによりそのコード全てがオリジナルに開発されたコンプリート・パッケージです。基本的な仕様を次に列記します。

- 線形補強平面波基底関数の使用
- 局所(スピン)密度近似の範囲でのスカラー相対論的なスピン分極の取り扱い
- 全電子自己無撞着フルポテンシャル法
- 全エネルギー及び原子に働く力の計算
- 補正付四面体法によるブリュアンゾーン積分
- 状態密度、電子(スピン)密度関数、ポテンシャル関数の計算
- 群論に基づく固有状態からの規約表現の抽出

本 HiLAPW2002 計算コードは FORTRAN90 言語に準拠し、動的メモリアロケーションを使用しているため、利用する計算機システムで一度コンパイルするだけで、ユーザーが対象とする系に依存せず実行が可能です。また、従来は煩わしかった入力データの設定が、標準データのデータベース化により簡素化されたとともに、ユーザーの習熟度に応じてデータベースを改編することにより高度なデータ設定が可能となっています。さらに、状態密度やバンド構造等をポストスクリプトファイルに変換できる汎用図形出力プログラム(PSP)もパッケージに含まれ、計算結果をスムーズに学術論文に掲載することが可能です。本 CMD[®]では、HiLAPW2002 のコンプリート・パッケージを公開します。

実習内容

基礎コースでは、典型的な単元素結晶系 (Cu、Si、Fe 等) を題材として、入力データの準備、セルフコンシステントな計算の実行、状態密度及びバンド構造の図形出力までを学修します。時間に余裕があれば、簡単な化合物系への発展も行います。

専門コースでは、以上に加えて、バンド構造からボルツマン理論に基づきフェルミ速度やホール係数等の計算を行い輸送現象の議論を進めます。

開発元

大阪大学産業科学研究所 小口研究室

(S) STATE-Senri (Simulation Tool for Atom TEchnology)

STATE は密度汎関数法に基づく第一原理分子動力学法プログラムパッケージです。本プログラムでは平面波基底およびウルトラソフト擬ポテンシャル法を用いることにより金属・半導体・酸化物から有機分子までの幅広い物質に対して、安定構造や電子状態、さらには、化学反応過程まで精度良くかつ効率の良いシミュレーションが可能です。以下のような機能を持っています。

- 局所密度近似(LDA)、一般化密度勾配近似(GGA)、LDA+U
- Troullier-Martins 型ソフト擬ポテンシャル、Vanderbilt 型ウルトラソフト擬ポテンシャル
- Davidson 法、RMM-DIIS 法による繰り返し部分対角化法
- Broyden 法、Bluegel 法による電子密度の最適化
- 四面体法、Methfessel-Paxton 法によるブリルアンゾーン内積分
- Quenched MD 法、GDIIS 法による構造最適化
- 速度スケール法、能勢の熱欲による定温分子動力学法
- Nudged Elastic Band 法、拘束条件付分子動力学法による反応経路探索
- 振動スペクトル(IR, HREELS)、電子スペクトル(XPS, UPS)、STM 像等の解析
- Projected Density of States 等による電子状態解析

実習内容

Beginner course : シリコン、アルミ、銅、等の単体の固体の計算を行い、状態密度構造を描きます。時間があれば水素分子やエチレン等、小分子の構造最適化、基準振動解析等を行います。

Advanced course : 、金属表面上の原子の吸着構造を求め、さらに、基準振動解析を行い、振動スペクトルを計算することを行います。また、原子の拡散過程をシミュレートし、拡散の活性化エネルギーを求めることを行います。

開発元

大阪大学大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻 森川研究室

(E) ES-Opt

ES-Opt は擬ポテンシャル法を用いた平面波基底展開による電子状態計算プログラムです。密度汎関数法における Kohn-Sham 方程式を、局所密度近似(LDA)を用いて数値的に解く点では、他のプログラムと同様です。ノルム保存擬ポテンシャルを用いています。共役勾配法を用いてエネルギー最適化問題を解く方法によって基底状態を求めています。プログラムのソースコードが比較的可読性に高く作られていることも特徴の一つです。全エネルギー、原子間力と内部応力を求めることができます。特に、メタ・ダイナミクス法を組み合わせた分子動力学シミュレーションによって、圧力誘起相転移や原子拡散などの問題に応用することができます。

実習内容

Beginner Course: Si などの簡単な系を用いて、電子状態計算の流れを理解し、入出力の扱い方を学んだのちに、プログラムを実際に動かして、そのソースコードを参照しながら学びます。全エネルギー、原子間力などを求め、簡単なバンド図の描画を行います。

Advanced Course: 以下のテーマのうちから受講生の興味によって題材を選択し、分子動力学シミュレーションを通して現象の解析方法を学びます。1) シリコン高圧相の圧力誘起相転移、2) 炭素高圧相の圧力誘起相転移、3) シリコン中の不純物拡散、4) その他参加者の興味に従った電子状態計算に関するテーマ

開発元

大阪大学大学院基礎工学研究科 草部浩一

(R) RSPACE

RSPACE は実空間差分法を用いて表面・界面のナノ構造の電子状態を密度汎関数法の局所密度近似の枠内で第一原理的に計算し、またそれに基づいて分子動力学を行うコードである。実空間法を用いるため、近年の高性能計算機の傾向である超並列計算機上での計算に適したアルゴリズムである。また、任意の境界条件の設定が可能であり、孤立境界条件を課したクラスターモデルの構造計算や周期境界条件を課した結晶のバンド計算、孤立境界と周期境界条件を組み合わせた表面やナノチューブの構造計算も可能である。さらには、Overbridging boundary-matching 法と組み合わせることにより、電極間に挟まれたナノ構造体の輸送特性計算も可能である。

実習内容

Beginner Course: テキストにそって、分子やバルクなどの簡単な系の電子状態を計算し、入出力の扱い方などプログラムの基本を理解する。全エネルギー、原子間力を計算し、平衡原子間距離や格子定数などを求める。

Advanced Course: Beginner コースの簡単な復習の後、以下のテーマのうちから受講生の興味によって題材を選択する。1) 並列計算機を用いた半導体表面・界面、カーボンナノチューブ、フラーレン等の原子・電子構造計算、2) 輸送特性計算コードの実習とナノ構造の輸送特性計算、3) その他

開発元

大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻

小野倫也

長崎大学先端計算研究センター

江上喜幸

企画

CMD[®]コンソーシアム

赤井久純（大阪大学グローニンゲン教育研究センター、OU-QEDRI）

笠井秀明（大阪大学大学院工学研究科、OU-QEDRI）

吉田 博（大阪大学大学院基礎工学研究科、OU-QEDRI）

鈴木 直（関西大学システム理工学部、OU-QEDRI）

草部浩一（大阪大学大学院基礎工学研究科、OU-QEDRI）

中西 寛（大阪大学大学院工学研究科、OU-QEDRI）

小倉昌子（大阪大学大学院理学研究科）

Wilson Agerico Dino（大阪大学大学院工学研究科、OU-QEDRI）

OU-QEDRI: Osaka University Quantum Engineering Design Research Initiative

大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター「CMD[®]係」

<http://www.insd.osaka-u.ac.jp/CMD/>

E-mail: cmd@insd.osaka-u.ac.jp

FAX : 06-6850-6342