

電子状態計算プログラムの改良 – 技術報告要旨 –

最終更新日 平成 16 年 11 月 4 日

1 開発目的

電子状態計算プログラムを用いて表面触媒系における触媒反応を解析するためのプログラム整備を行う。着目原子の電子状態の微細な知見を得ることを目的に電子状態計算プログラムを改良する。

- 電子状態計算プログラムへの機能追加
物質の微視的構造からゼーマン効果・スピン軌道相互作用効果を計算し、EPRg テンソルを導出する機能を加える。本案件では GIPAW 法 [2] を使用する。
- 機能追加した電子状態計算プログラムを使用したテスト計算
本プログラムを用いてテスト計算を行い、プログラムの解析機能の確認を行う。

2 開発環境

開発用サーバ: PC クラスタ

使用言語: fortran90

通信ライブラリ: mpich

3 開発内容

NMR(Nuclear Magnetic Resonance), EPR(Electron Paramagnetic Resonance) は原子核近傍の波動関数の詳細な形状が本質的な影響を持ちます。通常の擬ポテンシャル法では原子核近傍の波動関数を滑らかに表現するため、これによる NMR, EPR の計算精度は十分ではありません。計算精度を保障するには全電子計算が必要であると考えられてきました。

Projector Augmented Wave 法 (PAW)[4] は擬ポテンシャル法の枠内で原子核近傍の波動関数の正確な形状を補正項として取り込むことができます。従って、擬ポテンシャル法に基づく NMR, EPR の計算精度を高めることが可能です。本案件で使用する GIPAW 法 [2] は磁場中の電子を取り扱うために PAW 法を拡張したものです。先の案件で GIPAW 法を使用して EPRg テンソルを計算するアルゴリズム [3] をご提案いたしました。本案件はそのアルゴリズム案に沿ったコーディング作業です。

磁場 \mathbf{B} についての摂動展開により、計算すべき EPRg テンソル g_{eff} は以下のようになります [3]。

$$g_{\text{eff}} \cdot \mathbf{B} = (g_e + \Delta g_{Z\text{-KE}} + \Delta g_{\text{SO}}^d + \Delta g_{\text{SO}}^p + \Delta g_{\text{SO}}^{\text{bare}} + \Delta g_{\text{SOO}}) \cdot \mathbf{B} \quad (1)$$

右辺は 2 階のテンソルとベクトル \mathbf{B} の積です。右辺 () 内の第 2 項以降が数値計算する部分となります。各項の計算は fortran90 の module 機能を使用して実装しております (表 1)。

module 名	内容
zke	Δg_{Z-KE} を計算する。
sod	$\Delta g_{SO}^{\Delta d}$ を計算する。
sop	$\Delta g_{SO}^{\Delta p}$ を計算する。
sobare	Δg_{SO}^{bare} を計算する。
soo	Δg_{SOO} を計算する。
com	共通の処理、変数、定数等を提供する。
corr	ノルム非保存型擬ポテンシャルを使用した場合の補正項を計算する
gncpp	全電子波動関数を出力する。
cgs	共役勾配法により連立方程式を解く。
cgm	共役勾配法エンジン
cur	誘導電流を計算する。
eprg	第一原理計算プログラムに書き込む API を提供する。
kmdcheck	単体テストを管理する。
utils	定数値/論理値を定義する。

表 1: EPRg プログラムの module

参考文献

- [1] C.Pickard and F.Mauri, "First-principle Theory of the EPRg Tensor in Solids : Defects in Quartz", Phys.Rev.Lett.88, 086403(2002)
- [2] C.Pickard and F.Mauri," All-electron magnetic response with pseudopotentials: NMR chemical shifts", Phys.Rev.B **63**, 245101(2001)
- [3] GIPAW 法による EPRg テンソルの計算 アルゴリズム案 改訂版 (弊社作成)
- [4] P. E. Blöchl, Phys. Rev. B **50**, 17953(1994)