

CCMSハンズオン OpenMX講習会

プログラム

13:00-13:30: OpenMXの概要

13:30-15:00: 基本計算の実習

(構造最適化、バンド計算、
状態密度計算等)

15:00-15:10: 休憩

15:10-17:10: 応用計算の実習

(スピントクスチャの解析、
ベリー曲率とトポロジカル不変量の計算)

講師

尾崎泰助 (東京大学物性研究所)

石井史之 (金沢大学ナノマテリアル研究所)

山口直也 (金沢大学ナノマテリアル研究所)

河村光晶 (東京大学物性研究所)

福田将大 (東京大学物性研究所)

質問等に関して

質問等があれば、slackに投稿して下さい。

<https://app.slack.com/client/T030YCKLSQ5/C0313JUT8VA>

資料は以下のwebからダウンロードできます。

<https://t-ozaki.issp.u-tokyo.ac.jp/openmx-hands-on-2022.html>

OpenMXの紹介

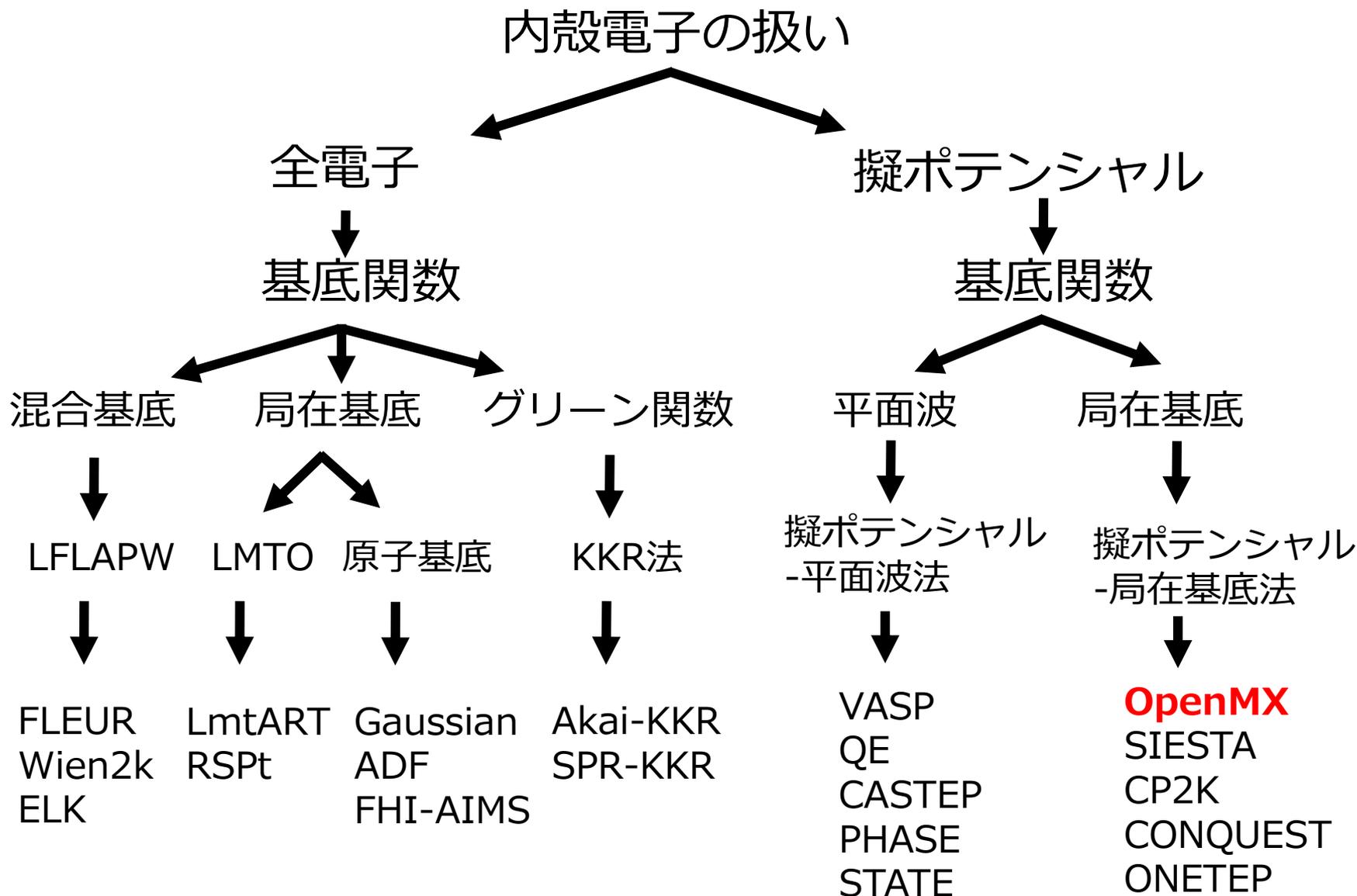
- Kohn-Sham方程式の数値解法
- OpenMXの開発経緯
- LCPAO法
- 基底関数最適化
- 擬ポテンシャル
- 全エネルギーの計算
- デルタゲージ
- まとめ

尾崎泰助

東京大学物性研究所

CCMSハンズオン OpenMX講習会 2022年2月22日

Kohn-Sham方程式の数値解法



一般的特徴: KS方程式の数値解法

全電子法+混合基底: Wien2k, FLEURなど

内殻電子を含んでおり、計算精度が高い。基底関数は原子近傍の数値動径基底、局在基底と平面波の混合基底であり、電子状態に応じた記述ができる。他の計算の参照データとして利用される。内殻電子が関与する物理量(内殻励起スペクトル等)の計算で強みがある。

擬ポテンシャル-平面波法: VAPS, QEなど

価電子のみを取り扱うため、計算が軽い。平面波基底はカットオフエネルギーのみで精度と効率を制御できるため、扱いが容易。様々な物理量を計算できる精度と効率に優れた手法。

擬ポテンシャル-局在基底法: OpenMX, SIESTAなど

価電子のみを取り扱うため、計算が軽い。局在基底は分子系や疎な構造の扱いで特に高速。オーダ-N法や非平衡グリーン関数法と整合性が良い。基底選択に経験が必要であり、初心者が戸惑いやすい。

OpenMX **Open** source package for **M**aterial **eX**plorer

- 密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算ソフトウェア
- ノルム保存型擬ポテンシャルを使用
- 最適化数値局在基底により、Kohn-Sham軌道を展開

基本機能

- LDA, GGA, LDA+UによるSCF計算
- 全エネルギー、力の計算
- バンド分散、状態密度
- 構造最適化(BFGS,RF,EF法等)
- 有効電荷解析(マリケン,ポロノイ,ESP)
- NEV,NVT分子動力学法
- 電荷ドーピング
- フェルミ面解析
- 電子密度等のCubeデータ
- 擬ポテンシャル&基底のデータベース 等

拡張機能

- オーダーN, 低次スケーリング法
- ノンコリニア磁性
- スピン軌道相互作用
- 非平衡グリーン関数法による電気伝導
- Berry位相による電気分極
- 最局在化Wannier関数
- 有効遮蔽体(ESM)法による電場印加
- NEB法による反応経路探索
- バンドunfolding法
- TH法によるSTM解析 等

OpenMXの歴史

2000年 開発開始

2003年 公開 (GNU-GPL)

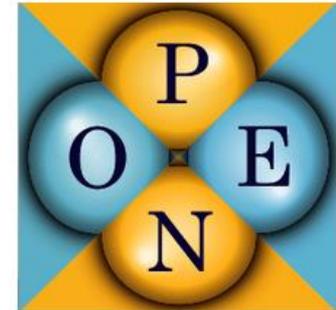
2003年 共同研究：
産総研
物材機構
ソウル大
金沢大
北陸先端大
日産自動車
富士通 等

2019年 19回のリリース、
Ver. 3.9に至る

Welcome to OpenMX
open source package for Material Explorer

Contents

- [What's new](#)
OpenMX Hands-On Workshop on 10th Oct. in Kobe
Patch (Ver.3.7.8) to OpenMX Ver. 3.7 (17/Feb/2014)
Release of OpenFFT Ver. 1.0 (04/Sep/2013)
- [What is OpenMX?](#)
- [Download](#)
- [Manual](#)
- [Technical Notes](#)
- [Publications](#)
- [OpenMX Forum](#)
- [Workshop](#)
- Database of VPS and PAO
[Ver. 2013](#)
- [ADPACK](#)
- [Miscellaneous informations](#)
- [Contributors](#)
- [Acknowledgment](#)
- [Links](#)



<http://www.openmx-square.org>

OpenMXの開発者

T. Ozaki (Univ. of Tokyo)
H. Kino (NIMS)
J. Yu (SNU)
M.J. Han (KAIST)
M. Ohfuchi (Fujitsu Labs.)
F. Ishii (Kanazawa Univ.)
K. Sawada (Kanazawa Univ.)
Y. Kubota (Kanazawa Univ.)
Y.P. Mizuta (Kanazawa Univ.)
H. Kotaka (Kyoto Univ.)
N. Yamaguchi (Kanazawa Univ.)
H. Sawahata (Kanazawa Univ.)
T.B. Prayitno (Kanazawa Univ.)
T. Ohwaki (NISSAN ARC)
T.V.T Duy (AISIN SEIKI)
M. Miyata (JAIST)
G. Jiang (Wuhan Univ. of Sci.&Tech.)
T. Iitaka (RIKEN)

P.-H. Chang (George Mason Univ.)
A. Terasawa (TIT)
Y. Gohda (TIT)
H. Weng (CAS)
Y. Shiihara (Toyota Tech. Inst.)
M. Toyoda (Tokyo Inst. Tech.)
Y. Okuno (FUJIFILM)
R. Perez (UAM)
P.P. Bell (UAM)
M. Ellner (UAM)
Yang Xiao (NUAA)
A.M. Ito (NIFS)
M. Otani (AIST)
M. Kawamura (Univ. of Tokyo)
K. Yoshimi (Univ. of Tokyo)
C.-C. Lee (Tamkang Univ.)
Y.-T. Lee (Academia Sinica)
M. Fukuda (Univ. of Tokyo)
S. Ryee (KAIST)
K. Terakura (AIST)

対象としている物質

実験との共同研究により ZrB_2 上のシリセン構造を初めて実証

A. Fleurence et al., Phys. Rev. Lett. 108, 245501 (2012).

実験との共同研究によりIr酸化物の $J_{\text{eff}}=1/2$ Mott状態を初めて実証

B.J. Kim et al., Phys. Rev. Lett. 101, 076402 (2008).

トポロジカル絶縁体の理論的予測

C.-H. Kim et al., Phys. Rev. Lett. 108, 106401 (2012).

H. Weng et al., Phys. Rev. X 4, 011002 (2014).

リチウムイオン電池の電極界面の第一原理分子動力学計算

T. Ohwaki et al., J. Chem. Phys. 136, 134101 (2012).

T. Ohwaki et al., J. Chem. Phys. 140, 244105 (2014).

磁石材料の磁気異方性の第一原理計算

Z. Torbatian et al., Appl. Phys. Lett. 104, 242403 (2014).

I. Kitagawa et al., Phys. Rev. B 81, 214408 (2010).

表面酸化Si基板上のグラフェンナノリボンの大規模電気伝導計算

H. Jippo et al., Appl. Phys. Express 7, 025101 (2014).

M. Ohfuchi et al., Appl. Phys. Express 4, 095101 (2011).

bcc-鉄中の金属炭化物析出物の界面構造予測

H. Sawada et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 21, 045012 (2013).

アモルファス金属酸化物を特徴付ける普遍的な中距離秩序構造を提案

K. Nishio et al., Phys. Rev. Lett. 340, 155502 (2013).

これまでの実績

シリセン、グラフェン

カーボンナノチューブ

遷移金属酸化物

金属酸化物

分子磁性体

希土類磁石材料

金属間化合物

リチウムイオン電池材料、

鉄鋼材料

金属(酸化物)アモルファス 等

関連論文

およそ1000報

OpenMXに関する情報

<http://www.openmx-square.org/index.html>

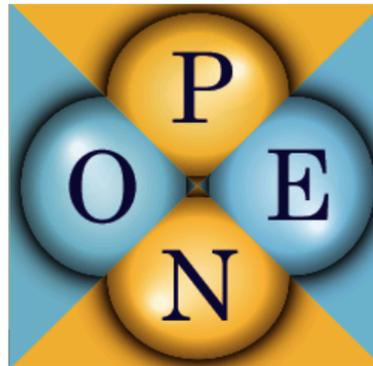
Welcome to OpenMX
open source package for Material explorer

- **What's new**

- Patch3.9.2 to OpenMX Ver 3.9 (Feb. 11, 2020)

- Patch3.9.1 to OpenMX Ver 3.9 (Jan. 02, 2020)

- **What is OpenMX?**
- **Download**
- **Manual of Ver. 3.9**
- **Manual of Ver. 3.8**
- **Technical Notes**
- **Video Lectures**
- **Publications**
- **OpenMX Forum**
- **OpenMX Viewer**
- **Workshop**
- **Database of Results**
- **Database of VPS and PAO**
 - **Ver. 2019**
 - **Ver. 2019 for core excitations**
- **ADPACK**
- **Miscellaneous informations**
- **Contributors**
- **Acknowledgment**
- **Opening positions**
- **Links**



- ソースコードのdownload
- 日本語/英語マニュアル
- OpenMX Forum
- 計算手法の詳細
- 出版論文
- 基底関数と擬ポテンシャルのデータベース

計算を始めるには…

- ご自身でインストール
- 大学の計算機センターや FOCUSにプレインストールされているものを使う
- MateriApps Live!を利用する

LCPAO法

(Linear-Combination of Pseudo Atomic Orbital Method)

一電子KS軌道を擬原子軌道の線形結合で表現する方法

$$\psi_{\sigma\mu}^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{R}_n \cdot \mathbf{k}} \sum_{i\alpha} c_{\sigma\mu, i\alpha}^{(\mathbf{k})} \phi_{i\alpha}(\mathbf{r} - \tau_i - \mathbf{R}_n),$$

$$\phi(\mathbf{r}) = Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) R(r)$$

特徴:

- 原子様基底を用いているため、計算結果の物理的・化学的解釈が容易。
- 基底関数系は厳密には完全系ではないため、完全な収束解を得ることは難しい。しかし物理的起源に基づく基底のため、注意深く構成された場合には比較的少ない基底関数で実質的に収束解を得ることが可能。
- 基底が局在しているため、硬い擬ポテンシャルの使用が可。高精度な擬ポテンシャルを作成することが可能。
- 基底の局在性のため、ハミルトニアン行列の計算量と保存メモリ量が $O(N)$ となる。
- 様々な $O(N)$ 法のアイデアと整合性が良い。

基底関数の変分最適化

1電子KS波動関数

$$\psi_{\mu}(\mathbf{r}) = \sum_{i\alpha} c_{\mu,i\alpha} \phi_{i\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

縮約軌道

$$\phi_{i\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_q a_{i\alpha q} \chi_{i\eta}(\mathbf{r})$$

a : 縮約係数

縮約係数 a を固定し、 c に関して変分をとれば

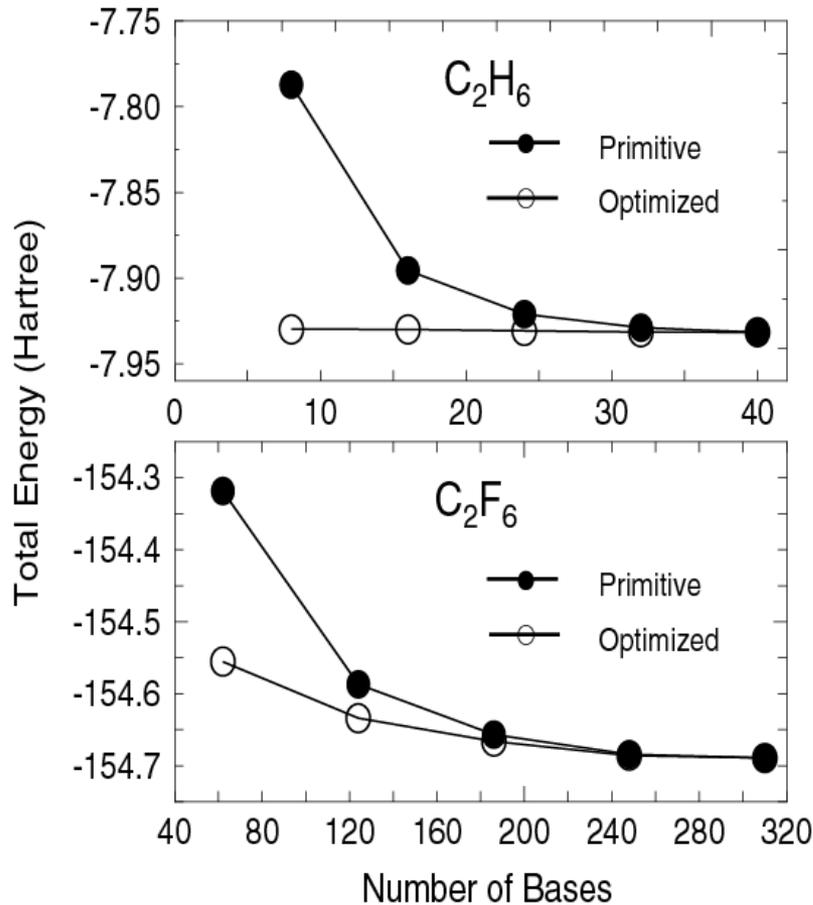
$$\partial E_{\text{tot}} / \partial c_{\mu,i\alpha} = 0 \quad \rightarrow \quad \sum_{j\beta} \langle \phi_{i\alpha} | \hat{H} | \phi_{j\beta} \rangle c_{\mu,j\beta} = \epsilon_{\mu} \sum_{j\beta} \langle \phi_{i\alpha} | \phi_{j\beta} \rangle c_{\mu,j\beta}$$

変数 c が a に対する従属変数であると見なし、さらに変数 c の観点でKS方程式が自己無撞着に解けていると仮定すると、次式が得られる。

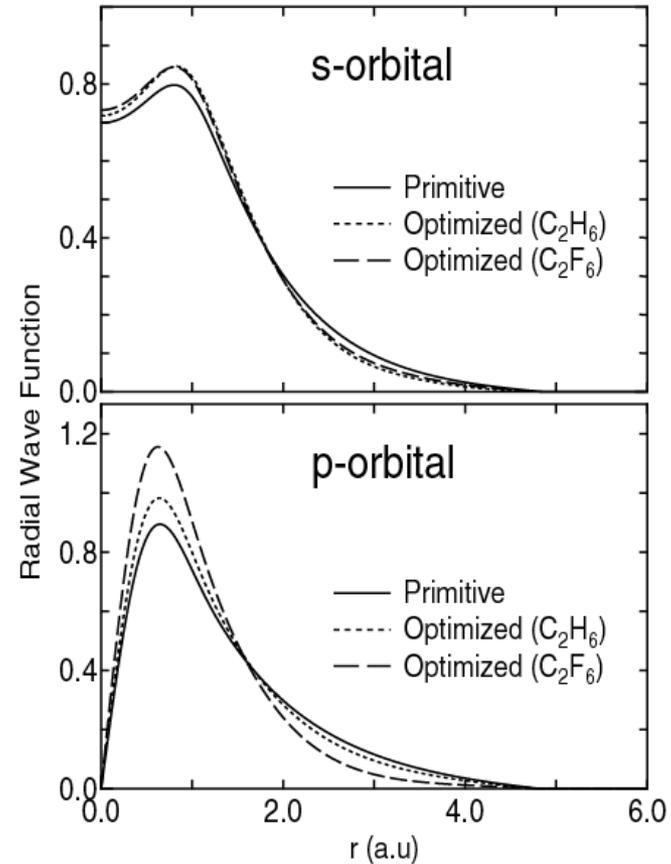
$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial a_{i\alpha q}} &= \frac{\delta E_{\text{tot}}}{\delta \rho(\mathbf{r})} \frac{\delta \rho(\mathbf{r})}{\delta a_{i\alpha q}} \\ &= 2 \sum_{j\beta} (\Theta_{i\alpha,j\beta} \langle \chi_{i\eta} | \hat{H} | \phi_{j\beta} \rangle - E_{i\alpha,j\beta} \langle \chi_{i\eta} | \phi_{j\beta} \rangle) \end{aligned}$$

Primitive vs. Optimized

エネルギーの収束性



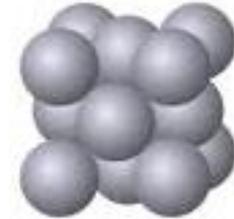
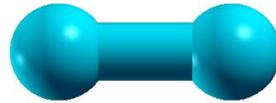
炭素原子の動径関数



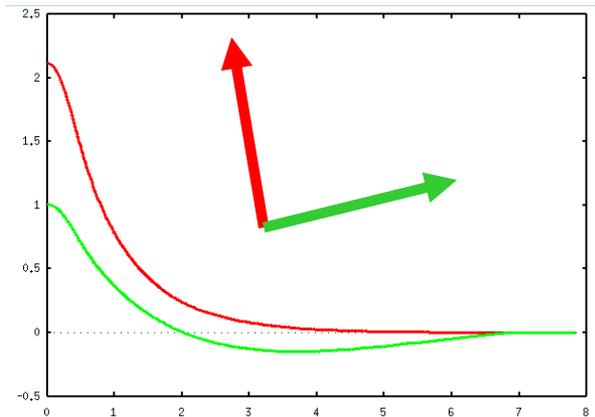
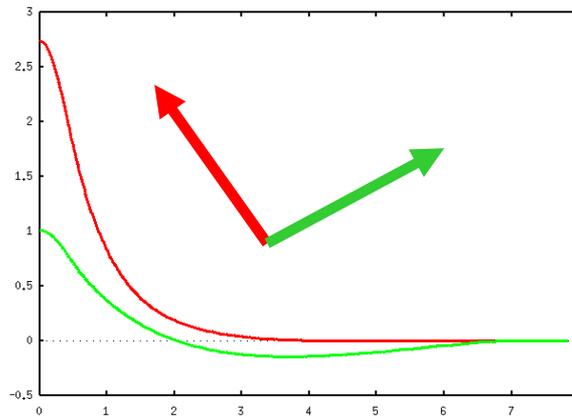
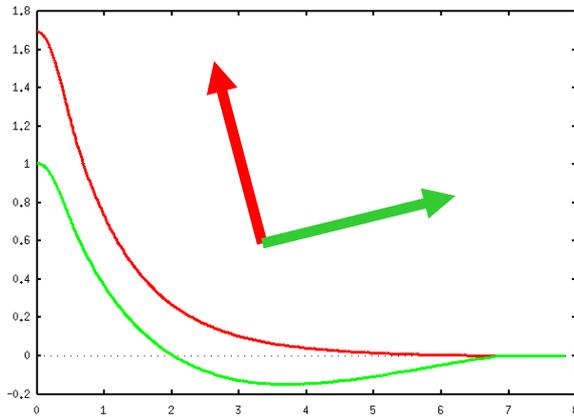
フッ素原子は炭素原子のp軌道から電子を引き抜く。
そのため、炭素原子のp軌道が大きく局在化する。

基底関数の最適化手順

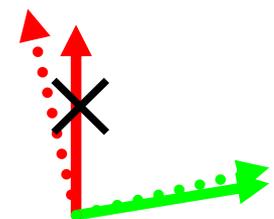
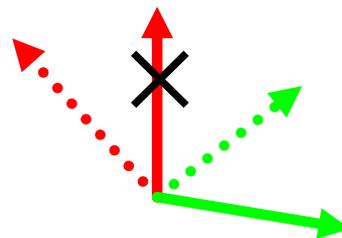
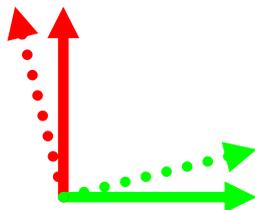
1. 典型的な化学的環境を選択



2. 動径波動関数を変分最適化



3. 部分空間内で回転し冗長成分を取り除いた後に統合



ノルム保存Vanderbilt擬ポテンシャル

I. Morrion, D.M. Bylander, and L. Kleinman, PRB 47, 6728 (1993).

Vanderbiltによって導入された以下の非局所演算子は選択された**複数**の**参照エネルギー**一点の周辺で、電子の散乱特性を再現する。

$$V_{\text{NL}} = \sum_{i,j} B_{ij} |\beta_i\rangle \langle \beta_j|$$

$$|\chi_i\rangle = V_{\text{NL}}^{(i)} |\phi_i\rangle = (\varepsilon_i - T - V_{\text{loc}}) |\phi_i\rangle$$

$$B_{ij} = \langle \phi_i | \chi_j \rangle$$

$$|\beta_i\rangle = \sum_j (B^{-1})_{ji} |\chi_j\rangle$$

もし以下の一般化ノルム保存条件が満たされたならば、行列Bはエルミートである。故にその場合には V_{NL} もまたエルミートである。

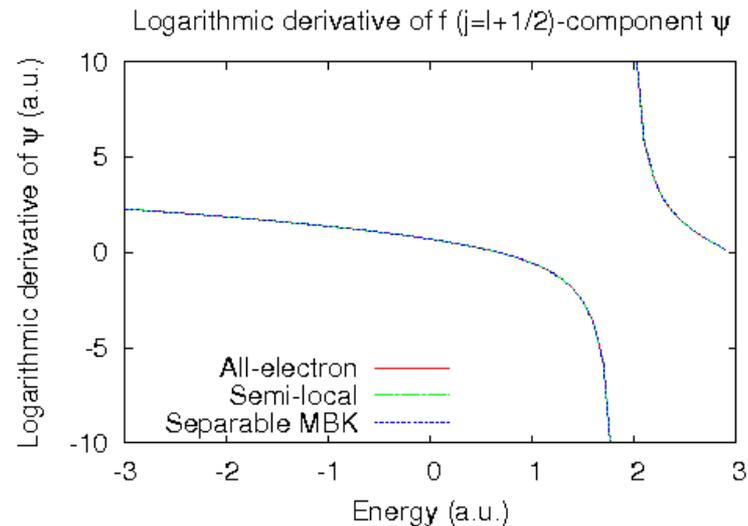
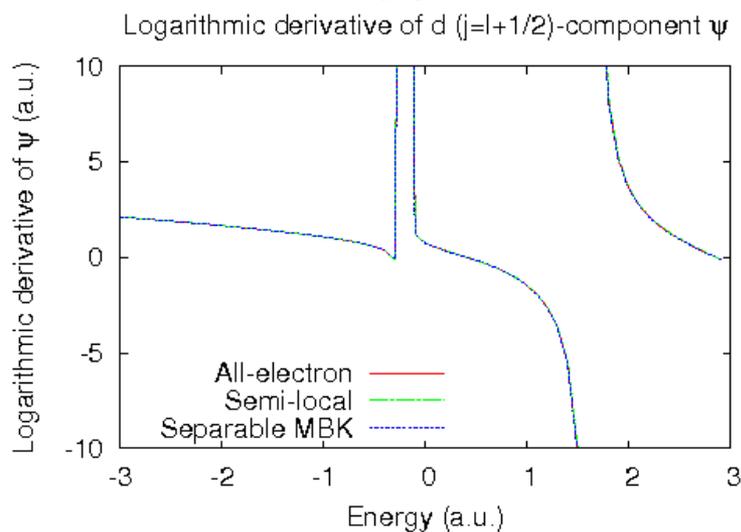
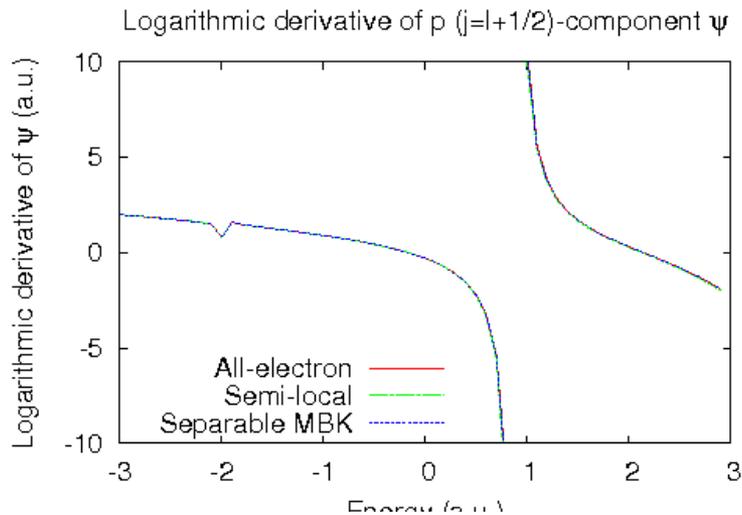
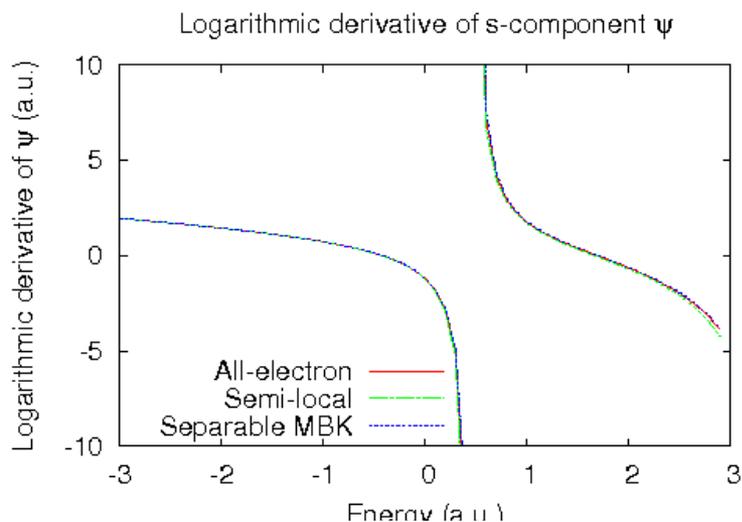
$$Q_{ij} = \langle \psi_i | \psi_j \rangle_R - \langle \phi_i | \phi_j \rangle_R$$

$$B_{ij} - B_{ji}^* = (\varepsilon_i - \varepsilon_j) Q_{ij}$$

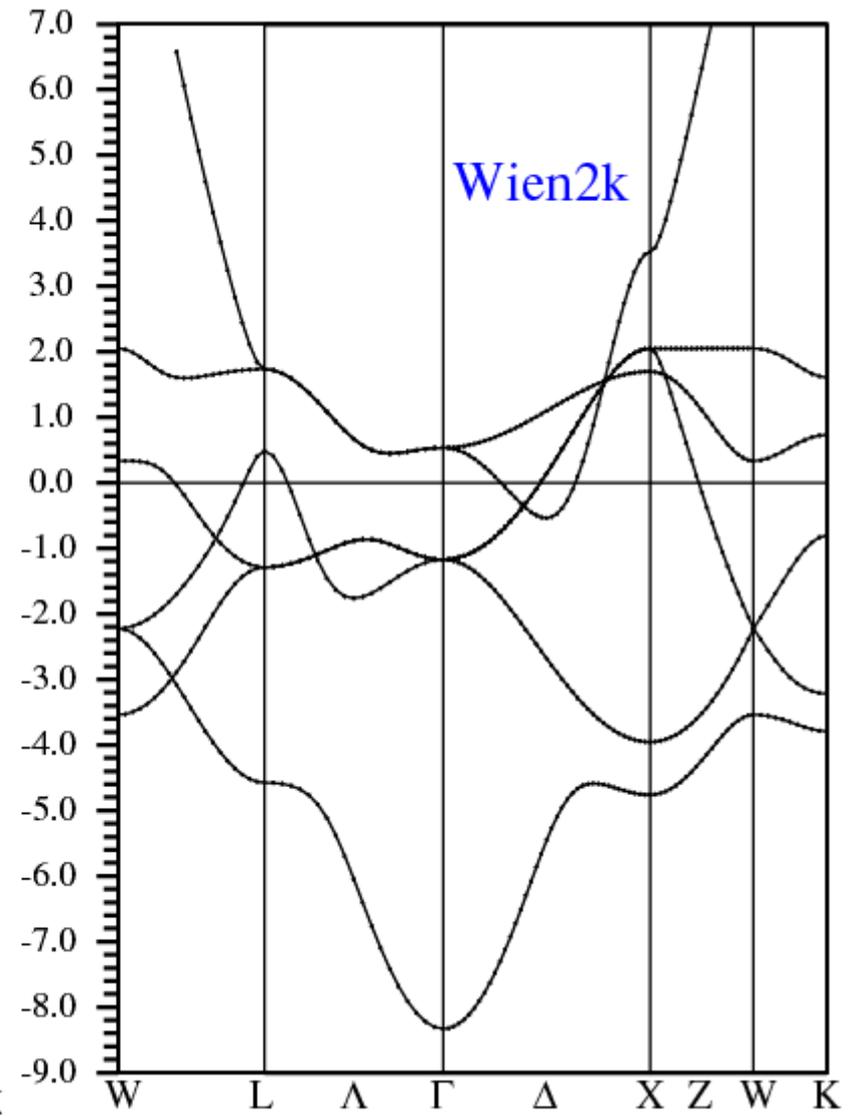
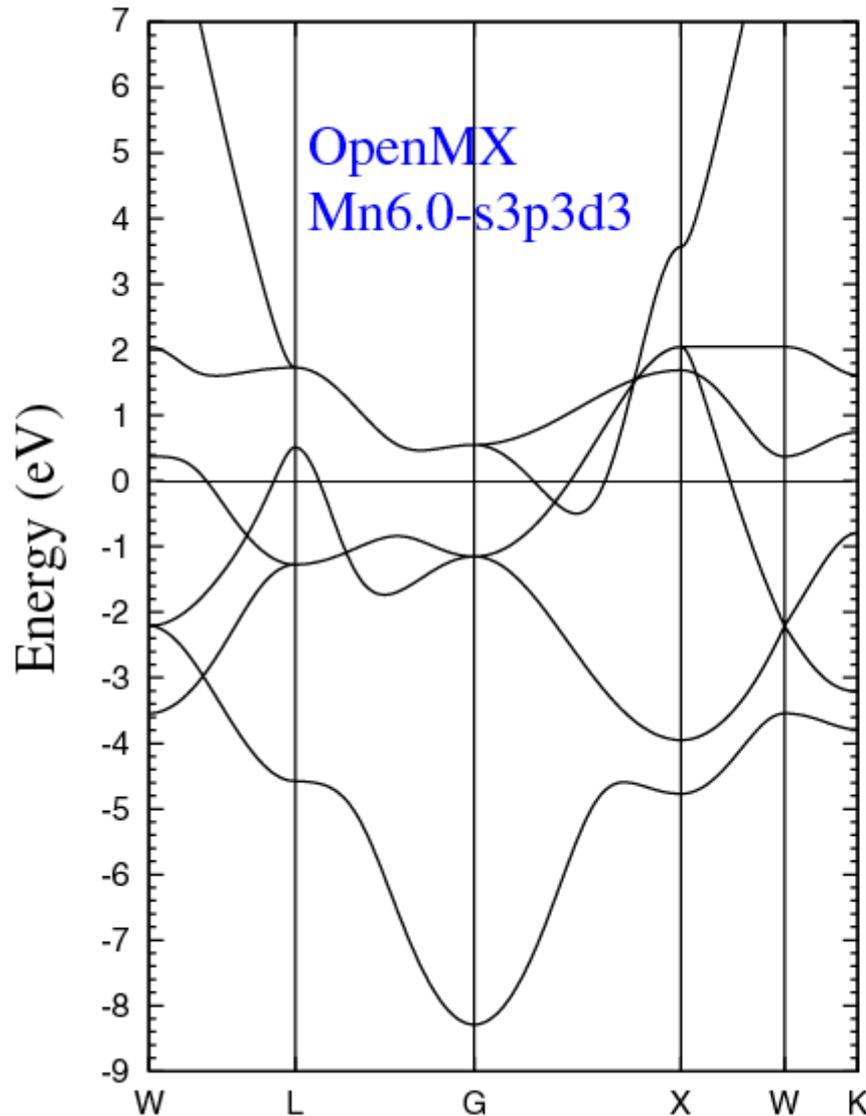
一般化ノルム保存
条件 $Q_{ij}=0$ を課す。

対数微分の比較

Mn原子のs, p, d, fチャンネルの対数微分。All-electronとSeparable MBK は良く一致している。対数微分がずれると通常、バンド構造が一致しなくなる。



fcc Mnのバンド構造の比較



データベースを構築する上でのWishリスト

- 擬ポテンシャルと全電子計算の対数微分は目視の範囲で完全に一致する。
- 固体の平衡格子定数がWien2kと比較して、0.005 Å以下である。
- 固体の体積弾性率がWien2kと比較して、3GPa以下である。
- バンド構造がWien2kと比較し、ほぼ同等である。
- 分子の最適化構造がこれまでの報告例とほぼ同等である。
- 分子の原子化エネルギーがこれまでの報告例とほぼ同等である。
- 基底関数重なり誤差が0.5 kcal/mol以下である。

擬ポテンシャル及び基底関数のデータベース

Database (2013) of optimized VPS and PAO

The database (2013) of fully relativistic pseudopotentials (VPS) and pseudo-atomic orbitals (PAO), generated by ADPACK, which could be an input data of program package, OpenMX. The data of elements with the underline are currently available. When you use these data, VPS and PAO, in the program package, OpenMX, then copy them to the directory, `openmx*/DFT_DATA13/VPS/` and `openmx*/DFT_DATA13/PAO/`, respectively. The delta factor of OpenMX with the database (2013) is found at [here](#).

<u>E</u>	高精度かつ高効率計算を実現するために、データベースを構築し、一般公開。																<u>He</u>
<u>Li</u>	<u>Be</u>									<u>B</u>	<u>C</u>	<u>N</u>	<u>O</u>	<u>F</u>	<u>Ne</u>		
<u>Na</u>	<u>Mg</u>									<u>Al</u>	<u>Si</u>	<u>P</u>	<u>S</u>	<u>Cl</u>	<u>Ar</u>		
<u>K</u>	<u>Ca</u>	<u>Sc</u>	<u>Ti</u>	<u>V</u>	<u>Cr</u>	<u>Mn</u>	<u>Fe</u>	<u>Co</u>	<u>Ni</u>	<u>Cu</u>	<u>Zn</u>	<u>Ga</u>	<u>Ge</u>	<u>As</u>	<u>Se</u>	<u>Br</u>	<u>Kr</u>
<u>Rb</u>	<u>Sr</u>	<u>Y</u>	<u>Zr</u>	<u>Nb</u>	<u>Mo</u>	<u>Tc</u>	<u>Ru</u>	<u>Rh</u>	<u>Pd</u>	<u>Ag</u>	<u>Cd</u>	<u>In</u>	<u>Sn</u>	<u>Sb</u>	<u>Te</u>	<u>I</u>	<u>Xe</u>
<u>Cs</u>	<u>Ba</u>	<u>L</u>	<u>Hf</u>	<u>Ta</u>	<u>W</u>	<u>Re</u>	<u>Os</u>	<u>Ir</u>	<u>Pt</u>	<u>Au</u>	<u>Hg</u>	<u>Tl</u>	<u>Pb</u>	<u>Bi</u>	<u>Po</u>	<u>At</u>	<u>Rn</u>
<u>Fr</u>	<u>Ra</u>	<u>A</u>															
	<u>L</u>	<u>La</u>	<u>Ce</u>	<u>Pr</u>	<u>Nd</u>	<u>Pm</u>	<u>Sm</u>	<u>Eu</u>	<u>Gd</u>	<u>Tb</u>	<u>Dy</u>	<u>Ho</u>	<u>Er</u>	<u>Tm</u>	<u>Yb</u>	<u>Lu</u>	
	<u>A</u>	<u>Ac</u>	<u>Th</u>	<u>Pa</u>	<u>U</u>	<u>Np</u>	<u>Pu</u>	<u>Am</u>	<u>Cm</u>	<u>Bk</u>	<u>Cf</u>	<u>Es</u>	<u>Fm</u>	<u>Md</u>	<u>No</u>	<u>Lr</u>	

実装：全エネルギー（1）

全エネルギーは5つの項の和で与えられる。数值的に高精度な実装を行うためにはクーロンエネルギーの再定式化が重要である。

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{ec}} + E_{\text{ee}} + E_{\text{xc}} + E_{\text{cc}}.$$

$$E_{\text{kin}} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i\alpha, j\beta} \rho_{\sigma, i\alpha j\beta}^{(\mathbf{R}_n)} h_{i\alpha j\beta, \text{kin}}. \quad \text{運動エネルギー}$$

$$\begin{aligned} E_{\text{ec}} &= E_{\text{ec}}^{(\text{L})} + E_{\text{ec}}^{(\text{NL})}, \quad \text{外場とのクーロン相互作用エネルギー} \\ &= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i\alpha, j\beta} \rho_{\sigma, i\alpha j\beta}^{(\mathbf{R}_n)} \langle \phi_{i\alpha}(\mathbf{r} - \tau_i) | \sum_I V_{\text{core}, I}(\mathbf{r} - \tau_I) | \phi_{j\beta}(\mathbf{r} - \tau_j - \mathbf{R}_n) \rangle \\ &\quad + \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i\alpha, j\beta} \rho_{\sigma, i\alpha j\beta}^{(\mathbf{R}_n)} \langle \phi_{i\alpha}(\mathbf{r} - \tau_i) | \sum_I V_{\text{NL}, I}(\mathbf{r} - \tau_I) | \phi_{j\beta}(\mathbf{r} - \tau_j - \mathbf{R}_n) \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{\text{ee}} &= \frac{1}{2} \int dr^3 n(\mathbf{r}) V_{\text{H}}(\mathbf{r}), \quad \text{Hartreeエネルギー} \\ &= \frac{1}{2} \int dr^3 n(\mathbf{r}) \{ V_{\text{H}}^{(\text{a})}(\mathbf{r}) + \delta V_{\text{H}}(\mathbf{r}) \}, \end{aligned}$$

$$E_{\text{xc}} = \int dr^3 \{ n_{\uparrow}(\mathbf{r}) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}) + n_{\text{pcc}}(\mathbf{r}) \} \epsilon_{\text{xc}}(n_{\uparrow} + \frac{1}{2}n_{\text{pcc}}, n_{\downarrow} + \frac{1}{2}n_{\text{pcc}}), \quad \text{交換相関エネルギー}$$

$$E_{\text{cc}} = \frac{1}{2} \sum_{I, J} \frac{Z_I Z_J}{|\tau_I - \tau_J|}. \quad \text{核間クーロンエネルギー}$$

実装：全エネルギー（2）

三つのクーロンエネルギーの和を再配分することで、厳密に三つの新しい項を導入できる。

$$E_{\text{ec}}^{(L)} + E_{\text{ee}} + E_{\text{cc}} = E_{\text{na}} + E_{\delta\text{ee}} + E_{\text{scc}},$$

中性原子エネルギー

$$\begin{aligned} E_{\text{na}} &= \int dr^3 n(\mathbf{r}) \sum_I V_{\text{na},I}(\mathbf{r} - \tau_I), && \text{短距離相互作用でかつ2中心} \\ &&& \text{積分に分解できる。} \\ &= \sum_{\sigma} \sum_n \sum_{i\alpha, j\beta} \rho_{\sigma, i\alpha j\beta}^{(\mathbf{R}_n)} \sum_I \langle \phi_{i\alpha}(\mathbf{r} - \tau_i) | V_{\text{na},I}(\mathbf{r} - \tau_I) | \phi_{j\beta}(\mathbf{r} - \tau_j - \mathbf{R}_n) \rangle \end{aligned}$$

差電子ハートリーエネルギー

$$E_{\delta\text{ee}} = \frac{1}{2} \int dr^3 \delta n(\mathbf{r}) \delta V_{\text{H}}(\mathbf{r}) \quad \text{長距離相互作用であるが、小さな寄与である。}$$

遮蔽核間反発エネルギー

$$E_{\text{scc}} = \frac{1}{2} \sum_{I,J} \left[\frac{Z_I Z_J}{|\tau_I - \tau_J|} - \int dr^3 n_I^{(a)}(\mathbf{r}) V_{\text{H},J}^{(a)}(\mathbf{r}) \right] \quad \text{短距離相互作用でかつ2中心相互作用。}$$

差電子密度

$$\begin{aligned} \delta n(\mathbf{r}) &= n(\mathbf{r}) - n^{(a)}(\mathbf{r}), \\ &= n(\mathbf{r}) - \sum_i n_i^{(a)}(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

中性原子ポテンシャル

$$V_{\text{na},I}(\mathbf{r} - \tau_I) = V_{\text{core},I}(\mathbf{r} - \tau_I) + V_{\text{H},I}^{(a)}(\mathbf{r} - \tau_I)$$

実装：全エネルギー (3)

したがって、全エネルギーは次式で与えられる。

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{na}} + E_{\text{ec}}^{(\text{NL})} + E_{\delta\text{ee}} + E_{\text{xc}} + E_{\text{scc}}.$$

それぞれの項の計算は計算精度と効率を考慮し、適切な数値積分法が適用される。

E_{kin}

E_{na}

$E_{\text{ec}}^{(\text{NL})}$

$E_{\delta\text{ee}}$

E_{xc}

E_{scc}

}

フーリエ変換を用いて、q空間で積分

}

等間隔グリッド(FFTグリッド)を用いて実空間で積分

細グリッドを用いて実空間で積分

カットオフエネルギーの選択

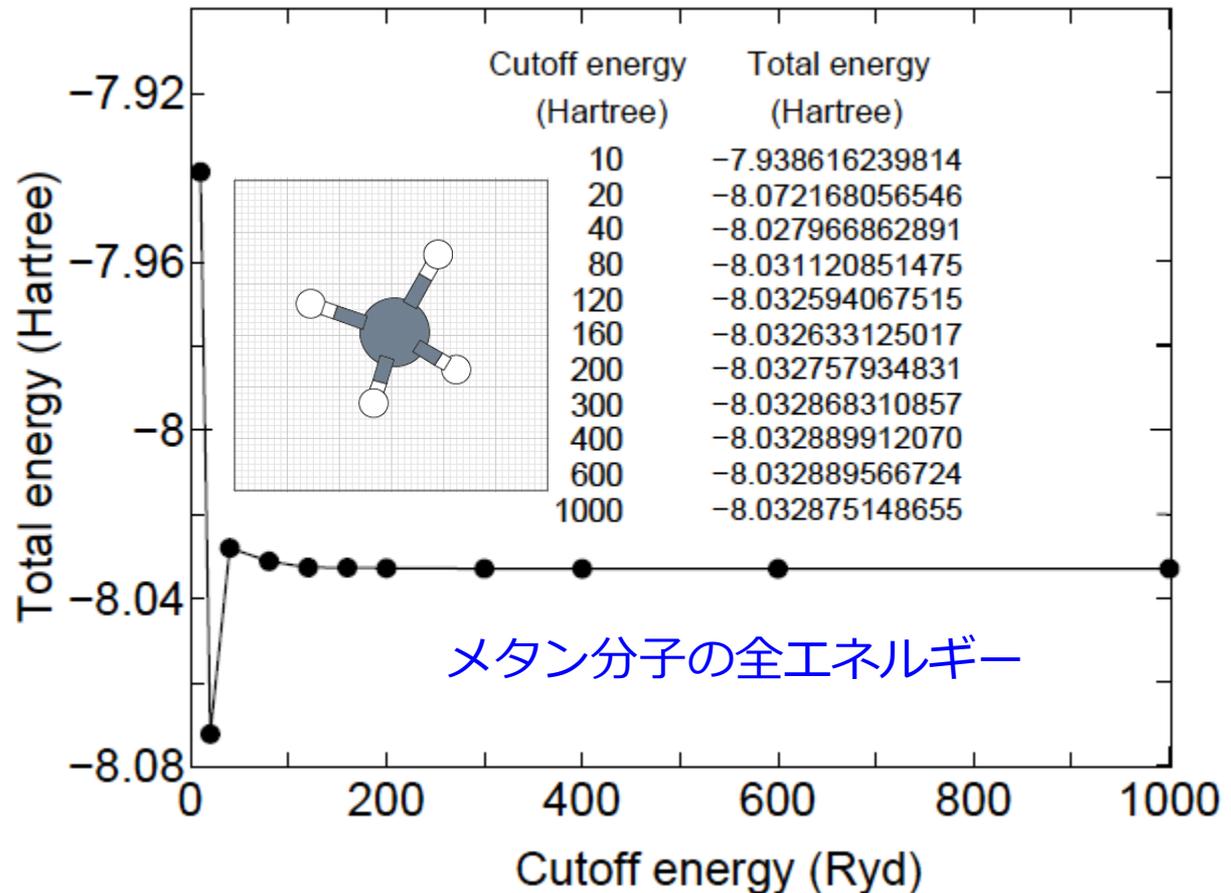
scf.energycutoff 200 # default=150 Ryd

実空間を離散化するFFTグリッドはscf.energycutoffで指定する。FFTグリッドはPoisson方程式の解法、 $E_{\delta_{ee}}$, E_{xc} の計算に使用する。

多くの系で200 Ryd程度で収束する。

擬ポテンシャルにセミコア状態を含む場合には、大きめのカットオフを取った方が安全。300-400 Ryd. 程度。

メモリの増加量:
 $O(E^{3/2})$



DFT計算の再現性に向けた試み

RESEARCH ARTICLE

Science **351**, aad3000 (2016)

DFT METHODS

Reproducibility in density functional theory calculations of solids

Kurt Lejaeghere,^{1*} Gustav Bihlmayer,² Torbjörn Björkman,^{3,4} Peter Blaha,⁵ Stefan Blügel,² Volker Blum,⁶ Damien Caliste,^{7,8} Ivano E. Castelli,⁹ Stewart J. Clark,¹⁰ Andrea Dal Corso,¹¹ Stefano de Gironcoli,¹¹ Thierry Deutsch,^{7,8} John Kay Dewhurst,¹² Igor Di Marco,¹³ Claudia Draxl,^{14,15} Marcin Dułak,¹⁶ Olle Eriksson,¹³ José A. Flores-Livas,¹² Kevin F. Garrity,¹⁷ Luigi Genovese,^{7,8} Paolo Giannozzi,¹⁸ Matteo Giantomassi,¹⁹ Stefan Goedecker,²⁰ Xavier Gonze,¹⁹ Oscar Grånäs,^{13,21} E. K. U. Gross,¹² Andris Gulans,^{14,15} François Gygi,²² D. R. Hamann,^{23,24} Phil J. Hasnip,²⁵ N. A. W. Holzwarth,²⁶ Diana Iuşan,¹³ Dominik B. Jochym,²⁷ François Jollet,²⁸ Daniel Jones,²⁹ Georg Kresse,³⁰ Klaus Koepernik,^{31,32} Emine Küçükbenli,^{9,11} Yaroslav O. Kvashnin,¹³ Inka L. M. Loch,^{13,33} Sven Lubeck,¹⁴ Martijn Marsman,³⁰ Nicola Marzari,⁹ Ulrike Nitzsche,³¹ Lars Nordström,¹³ Taisuke Ozaki,³⁴ Lorenzo Paulatto,³⁵ Chris J. Pickard,³⁶ Ward Poelmans,^{1,37} Matt I. J. Probert,²⁵ Keith Refson,^{38,39} Manuel Richter,^{31,32} Gian-Marco Rignanese,¹⁹ Santanu Saha,²⁰ Matthias Scheffler,^{15,40} Martin Schlipf,²² Karlheinz Schwarz,⁵ Sangeeta Sharma,¹² Francesca Tavazza,¹⁷ Patrik Thunström,⁴¹ Alexandre Tkatchenko,^{15,42} Marc Torrent,²⁸ David Vanderbilt,²³ Michiel J. van Setten,¹⁹ Veronique Van Speybroeck,¹ John M. Wills,⁴³ Jonathan R. Yates,²⁹ Guo-Xu Zhang,⁴⁴ Stefaan Cottenier^{1,45*}

15コード
69名が参加
71 elemental bulks
GGA-PBE
スカラー相対論

Δ-ゲージを用いた各コード間の比較

		AE									
		average <Δ>	Elk	exciting	FHI-aims/tier2	FLEUR	FPLO/T+F+s	RSpt	WIEN2k/acc		
		0.6		0.3	0.3	0.6	1.0	0.9	0.8	0.9	0.3
		0.5	0.3		0.1	0.5	0.9	0.8	0.6	0.9	0.2
		0.5	0.3	0.1		0.5	0.9	0.8	0.6	0.9	0.2
		0.6	0.6	0.5	0.5		0.8	0.6	0.8	0.6	0.4
		0.9	1.0	0.9	0.9	0.8		0.9	0.9	0.9	0.9
		0.8	0.9	0.8	0.8	0.6	0.9		0.9		0.8
		0.5	0.3	0.2	0.2	0.4	0.9	0.9	0.8		
AE											
Elk		0.9	0.9	0.8	0.8	0.9	1.3	1.1	0.8		
exciting		1.4	1.3	1.3	1.3	1.3	1.7	1.5	1.3		
FHI-aims/tier2		1.6	1.5	1.5	1.5	1.5	1.8	1.7	1.5		
FLEUR		0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.9	0.7	0.5		
FPLO/T+F+s		0.9	0.9	0.8	0.8	0.8	1.3	1.1	0.8		
RSpt		0.9	0.9	0.8	0.8	1.3	1.1	0.8			
WIEN2k/acc		0.6	0.4	0.4	0.4	0.6	1.0	0.8	0.3		
PAW											
GBRV12/ABINIT		1.1	1.1	1.1	1.0	1.0	1.4	1.3	1.0		
GPAW09/ABINIT		1.1	1.0	1.0	0.9	1.0	1.4	1.3	1.0		
GPAW09/GPAW		0.7	0.4	0.5	0.5	0.7	1.0	1.0	0.5		
JTH02/ABINIT		0.5	0.4	0.3	0.3	0.5	0.9	0.8	0.3		
PS11b100/QE		6.3	6.3	6.3	6.3	6.3	6.4	6.5	6.2		
VASP											
GBRV14/CASTEP		1.1	1.1	1.1	1.0	1.0	1.4	1.3	1.0		
GBRV14/QE		1.1	1.0	1.0	0.9	1.0	1.4	1.3	1.0		
OTFG9/CASTEP		0.7	0.4	0.5	0.5	0.7	1.0	1.0	0.5		
SSSP/QE		0.5	0.4	0.3	0.3	0.5	0.9	0.8	0.3		
Vdb2/DACAPO		6.3	6.3	6.3	6.3	6.3	6.4	6.5	6.2		
USPP											
FHI98pp/ABINIT		13.3	13.5	13.4	13.4	13.2	13.0	13.2	13.4		
HGH/ABINIT		2.2	2.2	2.2	2.2	2.0	2.3	2.2	2.1		
HGH-NLCC/BigDFT		1.1	1.1	1.1	1.1	1.0	1.2	1.1	1.0		
NCPP											
ONCVSPSP (PD0.1)/ABINIT		2.0	2.1	2.1	2.1	1.9	1.8	1.8	2.0		
ONCVSPSP (SG15) 1/QE		0.7	0.7	0.7	0.7	0.6	1.0	0.8	0.6		
ONCVSPSP (SG15) 2/CASTEP		1.4	1.4	1.3	1.3	1.3	1.6	1.5	1.3		
ONCVSPSP (SG15) 2/CASTEP		1.4	1.4	1.4	1.4	1.3	1.6	1.5	1.4		

OpenMXの平均Δ-ゲージは2.0meV/atomである。

まとめ

- OpenMXは密度汎関数理論、ノルム保存型擬ポテンシャル、最適化数値局在基底に基づく第一原理電子状態計算ソフトウェアであり、GPLv3で公開されている。
- 基底関数、ノルム保存型擬ポテンシャルが整備されており、速やかに応用計算を実行することが可能である。
- これまでにシリセン、グラフェン、遷移金属酸化物、金属酸化物、希土類磁石材料、金属間化合物、リチウムイオン電池材料、鉄鋼材料など多岐に渡る応用計算が報告されており、1000本以上の論文が出版されている。
- 日本、韓国、台湾、中国を中心として開発が継続されており、今後も拡張機能の実装が予定されている。