

OpenMXによる第一原理計算 #1

- OpenMXの紹介
- 導入計算

尾崎泰助
東京大学物性研究所

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)

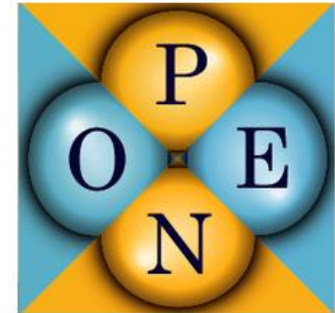
2003年 共同研究：
産総研
物材機構
ソウル大
金沢大
北陸先端大
日産自動車
富士通 等

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>

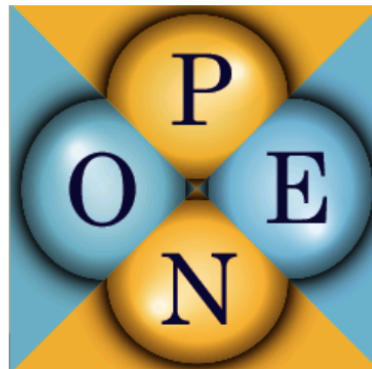
Welcome to OpenMX
Open source package for Material explorer

- **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

まず始めてみる

メタン分子のSCF計算を実行する。

```
ozaki@mx17:~/openmx3.9/work
```

```
[ozaki@mx17 work]$ mpirun -np 4 ./openmx Methane.dat | tee met.std
```

計算が正常に終了すると様々なファイルが生成される。

```
ozaki@mx17:~/openmx3.9/work
```

```
[ozaki@mx17 work]$ ls met.*  
met.cif      met.ene  met.md2  met.std      met.v0.cube  met.xyz  
met.dden.cube met.md   met.out  met.tden.cube met.vhart.cube  
[ozaki@mx17 work]$
```

OpenMXにおけるinput file

```
System.CurrentDirectory    ./    # default=./
System.Name                met
level.of.stdout            1    # default=1 (1-3)
level.of.fileout           1    # default=1 (0-2)
```

```
#
# Definition of Atomic Species
#
```

```
Species.Number            2
<Definition.of.Atomic.Species>
  H   H5.0-s1             H_PBE13
  C   C5.0-s1p1           C_PBE13
Definition.of.Atomic.Species>
```

```
#
# Atoms
#
```

```
Atoms.Number              5
Atoms.SpeciesAndCoordinates.Unit    Ang # Ang|AU
<Atoms.SpeciesAndCoordinates>
  1  C      0.000000    0.000000    0.000000    2.0  2.0
  2  H     -0.889981   -0.629312    0.000000    0.5  0.5
  3  H      0.000000    0.629312   -0.889981    0.5  0.5
  4  H      0.000000    0.629312    0.889981    0.5  0.5
  5  H      0.889981   -0.629312    0.000000    0.5  0.5
Atoms.SpeciesAndCoordinates>
```

- (1) Keywordの後に値を与える。
- (2) Keywordの順番は任意で良い。
- (3) コメント文は #を文頭に入れる。

いくつかのkeywords:

システム名：この名前で様々な
ファイルを保存

系に含まれる原子数

原子種の定義

原子の座標

出力ファイル

例えばMethane.datの計算が正常終了した場合、11個のファイルと一つのディレクトリが生成される。

met.std	standard output of the SCF calculation
met.out	input file and standard output
met.xyz	final geometrical structure
met.ene	values computed at every MD step
met.md	geometrical structures at every MD step
met.md2	geometrical structure of the final MD step
met.cif	cif file of the initial structure for Material Studio
met.tden.cube	total electron density in the Gaussian cube format
met.v0.cube	Kohn-Sham potential in the Gaussian cube format
met.vhart.cube	Hartree potential in the Gaussian cube format
met.dden.cube	difference electron density measured from atomic density
met_rst/	directory storing restart files

met.outの中身

SCFの履歴

```
*****
*****
SCF history at MD= 1
*****
*****
```

SCF=	1	NormRD=	1.000000000000	Uele=	-3.523143659974
SCF=	2	NormRD=	0.567253699744	Uele=	-4.405605131921
SCF=	3	NormRD=	0.103433490729	Uele=	-3.982266241934
SCF=	4	NormRD=	0.024234990593	Uele=	-3.906896836134
SCF=	5	NormRD=	0.011006215697	Uele=	-3.893084558820
SCF=	6	NormRD=	0.006494145332	Uele=	-3.890357113476
SCF=	7	NormRD=	0.002722267527	Uele=	-3.891668816209
SCF=	8	NormRD=	0.000000672350	Uele=	-3.889285164733
SCF=	9	NormRD=	0.000000402419	Uele=	-3.889285102456
SCF=	10	NormRD=	0.000000346348	Uele=	-3.889285101128
SCF=	11	NormRD=	0.000000515395	Uele=	-3.889285101063

KS固有値

```
*****
*****
Eigenvalues (Hartree) for SCF KS-eq.
*****
*****
```

Chemical Potential (Hartree) = 0.000000000000
Number of States = 8.000000000000
HOMO = 4
Eigenvalues

	Up-spin	Down-spin
1	-0.69897190537228	-0.69897190537228
2	-0.41522646150979	-0.41522646150979
3	-0.41522645534084	-0.41522645534084
4	-0.41521772830844	-0.41521772830844
5	0.21218282298348	0.21218282298348
6	0.21218282358344	0.21218282358344
7	0.21227055734372	0.21227055734372
8	0.24742493684297	0.24742493684297

全エネルギー

```
*****
Total energy (Hartree) at MD = 1
*****
```

Uele.	-3.889285101063
Ukin.	5.533754016241
UHO.	-14.855520072374
UH1.	0.041395625260
Una.	-5.040583803800
Unl.	-0.134640939010
Uxc0.	-1.564720823137
Uxc1.	-1.564720823137
Ucore.	9.551521413583
Uhub.	0.000000000000
Ucs.	0.000000000000
Uzs.	0.000000000000
Uzo.	0.000000000000
Uef.	0.000000000000
UvdW	0.000000000000
Utot.	-8.033515406373

マリケン電荷

```
*****
*****
Mulliken populations
*****
*****
```

Total spin S = 0.000000000000

	Up spin	Down spin	Sum	Diff
1 C	2.509755704	2.509755704	5.019511408	0.000000000
2 H	0.372561098	0.372561098	0.745122197	0.000000000
3 H	0.372561019	0.372561019	0.745122038	0.000000000
4 H	0.372561127	0.372561127	0.745122254	0.000000000
5 H	0.372561051	0.372561051	0.745122102	0.000000000

Sum of Mull:	up =	4.00000	down =	4.00000
	total=	8.00000	ideal(neutral)=	8.00000

標準出力

```
2   H  MulP  0.2867  0.2867  sum  0.5733
3   H  MulP  0.2867  0.2867  sum  0.5733
4   H  MulP  0.2867  0.2867  sum  0.5733
5   H  MulP  0.2867  0.2867  sum  0.5733
Sum of MulP: up   =  4.00000 down   =  4.00000
              total=  8.00000 ideal(neutral)=  8.00000
<DFT> Total Spin Moment (muB) = 0.000000000000
<DFT> Mixing_weight= 0.028087938921
<DFT> Uele   = -4.381387140168 dUele   = 0.188324995269
<DFT> NormRD = 0.541215648239 Criterion = 0.000000000100
```

標準出力を保存したmet.stdを確認することで、SCFの途中経過を確認することができる。

```
***** MD= 1 SCF= 5 *****
<Poisson> Poisson's equation using FFT...
<Set_Hamiltonian> Hamiltonian matrix for VNA+dVH+Vxc...
<Cluster> Solving the eigenvalue problem...
1   C  MulP  2.8340  2.8340  sum  5.6681
2   H  MulP  0.2915  0.2915  sum  0.5830
3   H  MulP  0.2915  0.2915  sum  0.5830
4   H  MulP  0.2915  0.2915  sum  0.5830
5   H  MulP  0.2915  0.2915  sum  0.5830
Sum of MulP: up   =  4.00000 down   =  4.00000
              total=  8.00000 ideal(neutral)=  8.00000
<DFT> Total Spin Moment (muB) = 0.000000000000
<DFT> Mixing_weight= 0.028087938921
<DFT> Uele   = -4.352426233354 dUele   = 0.028960906814
<DFT> NormRD = 0.509921689438 Criterion = 0.000000000100
```

MDとSCFのステップ数

各原子のマリケン電荷

Kohn-Sham固有値エネルギーと前回のSCFステップでの値との差分

```
***** MD= 1 SCF= 6 *****
<Poisson> Poisson's equation using FFT...
<Set_Hamiltonian> Hamiltonian matrix for VNA+dVH+Vxc...
<Cluster> Solving the eigenvalue problem...
1   C  MulP  2.5075  2.5075  sum  5.0150
2   H  MulP  0.3731  0.3731  sum  0.7463
3   H  MulP  0.3731  0.3731  sum  0.7463
4   H  MulP  0.3731  0.3731  sum  0.7463
5   H  MulP  0.3731  0.3731  sum  0.7463
Sum of MulP: up   =  4.00000 down   =  4.00000
              total=  8.00000 ideal(neutral)=  8.00000
<DFT> Total Spin Moment (muB) = 0.000000000000
<DFT> Mixing_weight= 0.028087938921
<DFT> Uele   = -3.886371199687 dUele   = 0.466055033667
<DFT> NormRD = 0.004026023251 Criterion = 0.000000000100
```

前回のSCFステップでの電荷密度との差分

SCFの収束条件

```
***** MD= 1 SCF= 7 *****
<Poisson> Poisson's equation using FFT...
<Set_Hamiltonian> Hamiltonian matrix for VNA+dVH+Vxc...
<Cluster> Solving the eigenvalue problem...
```

水素分子の結合エネルギーを計算する

水素原子の計算

 ozaki@mx17:~/openmx3.9/work

```
[ozaki@mx17 work]$ mpirun -np 1 ./openmx H.dat | tee h.std
```

https://t-ozaki.issp.u-tokyo.ac.jp/mpcoms2021_lectures/datfiles/H.dat から入力ファイルはダウンロードできます。

水素分子の計算

 ozaki@mx17:~/openmx3.9/work

```
[ozaki@mx17 work]$ mpirun -np 2 ./openmx H2.dat | tee h2.std
```

https://t-ozaki.issp.u-tokyo.ac.jp/mpcoms2021_lectures/datfiles/H2.dat から入力ファイルはダウンロードできます。

計算が正常に終了すると様々なファイルが生成される。

 ozaki@mx17:~/openmx3.9/work

```
[ozaki@mx17 work]$ ls h.*
h.cif      h.den0.cube  h.ene  h.md2  h.sden.cube  h.tden.cube  h.v1.cube  h.xyz
h.dden.cube h.den1.cube  h.md   h.out  h.std        h.v0.cube    h.vhart.cube
[ozaki@mx17 work]$ ls h2.*
h2.Dos.val  h2.dden.cube      h2.lumo0_0_r.cube  h2.out      h2.v0.cube
h2.Dos.vec  h2.ene            h2.md              h2.std      h2.vhart.cube
h2.cif      h2.homo0_0_r.cube h2.md2             h2.tden.cube h2.xyz
[ozaki@mx17 work]$
```

h.outとh2.outから全エネルギーを取得

h.outとh2.outを開いて、全エネルギーを取得する。以下の値が得られる。

水素原子	Utot.	-0.499351255995
------	-------	-----------------

水素分子	Utot.	-1.165981886187
------	-------	-----------------

したがって結合エネルギーは以下のように計算できる。

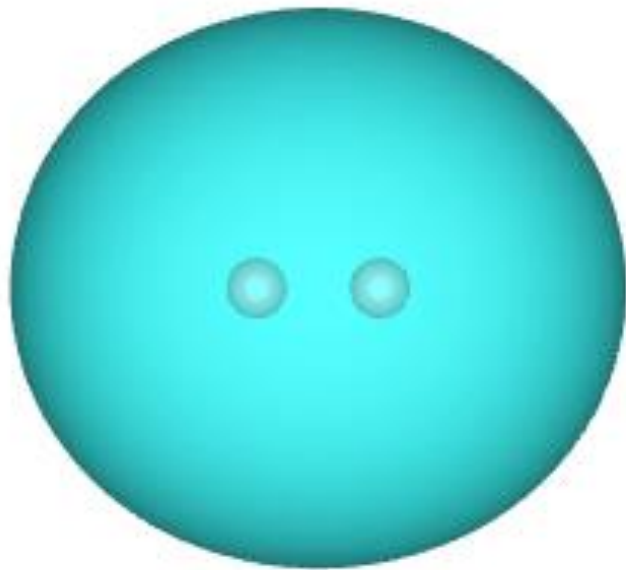
$$\begin{aligned}\text{結合エネルギー} &= 2 \text{ H} - \text{H}_2 \\ &= 2 \times (-0.49935) - (-1.16598) \\ &= 0.1673 \text{ (Hartree)} \\ &= 4.55 \text{ (eV)}\end{aligned}$$

実験値	4.75 (eV)
-----	-----------

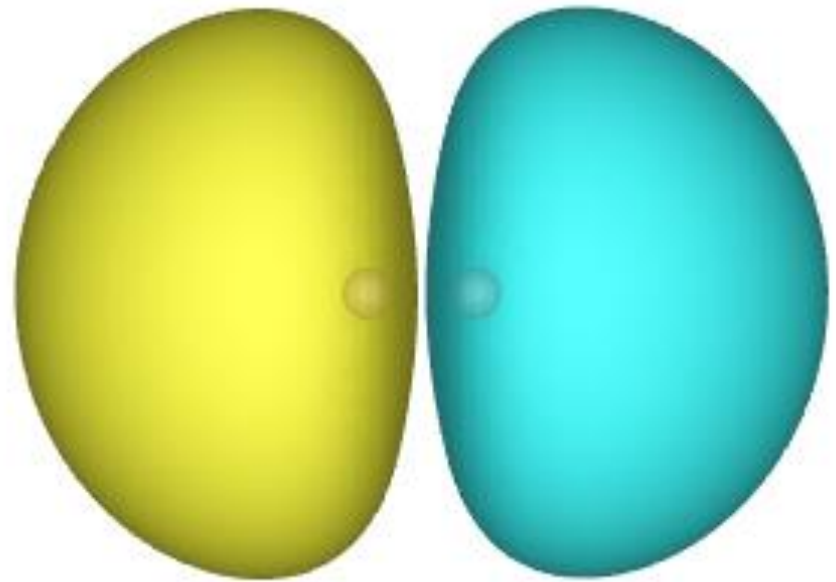
CubeファイルをVESTAで可視化する

水素分子の計算後にHOMOとLUMOに対するcubeファイルが生成する。
VESTAを用いて可視化できる。

h2.homo0_0_r.cube



h2.lumo0_0_r.cube



VESTAのwebsite <http://jp-minerals.org/vesta/jp/>