

オーダー $N$ 法第一原理計算プログラム CONQUEST における局在基底の最適化  
Optimization of localized basis functions in a linear-scaling DFT code CONQUEST

中田彩子<sup>1</sup>、Sergiu Arapan<sup>1</sup>、David R. Bowler<sup>2</sup>、宮崎剛<sup>1</sup>

Ayako Nakata, Sergiu Arapan, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki

物質・材料研究機構<sup>1</sup>、University College London<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Computational Materials Science Center, National Institute for Materials Science (NIMS), 1-2-1 Sengen, Tsukuba, Ibaraki, 305-0047, Japan

<sup>2</sup>Department of Physics & Astronomy, University College London (UCL), Gower St, London, WC1E 6BT, U.K.

オーダー $N$ 法第一原理計算は大規模系を高精度に取り扱うための有力な手法である<sup>[1]</sup>。我々の開発しているプログラムCONQUESTでは、密度行列最小化法に基づいて計算を行う際に密度行列の局所性を利用することでオーダー $N$ を実現しており、密度行列計算における切断半径 $R$ を調節することで計算の精度やコストを制御できる。最近では固体シリコンに対するテスト計算により、百万原子を越える系に対する第一原理計算も可能であることを示している<sup>[2]</sup>。

CONQUEST では Blip 基底、擬原子軌道(PAO)基底の二種類の実空間基底を用いることができる。Blip 基底はスプライン関数を周期的に配置した有限要素基底であり、平面波基底と同様に基底の間隔を調整することで精度を系統的に向上させることができるが、高精度な計算を行うためには数多くの基底を用いなければならない。一方、PAO 基底では、各原子上に局在化した基底関数を用いることによって、少数の基底で効率的に高精度な結果を得ることができる。

原子基底の精度を系統的に向上することは難しいが、一般的に原子の各軌道の記述に用いられる基底の数が多いほど高精度である。この各軌道上の複数の基底関数は、適切に線形結合を取ることによって、より少数の基底関数へと縮約することができる。CONQUEST では、この線形結合(縮約)係数を各原子上で最適化することによって、基底関数の数を減らすことが可能となっている。最近Raysonらにより、各原子における切断半径内の分子軌道を少数の原子基底に射影することによって縮約係数を決定する方法が提案された<sup>[3]</sup>。この方法では周囲の原子の影響を取り込みながら縮約係数を決定することができるので、より高精度な局在基底を作ることができる。

本発表では、PAO 基底を用いた場合の計算精度を、Blip 基底を用いた場合や、平面波基底を用いた他の代表的な第一原理計算プログラムの計算結果との比較を行いながら検証する。また、PAO 基底の縮約に関する精度の検証や、Rayson らの方法に基づいた最適化手法の改善に向けた試みも報告する。

[1] D. R. Bowler and T. Miyazaki, Rep. Prog. Phys. **75**, 036503 (2012).

[2] D. R. Bowler and T. Miyazaki, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 074207 (2010).

[3] M. J. Rayson and P. R. Briddon, Phys. Rev. B **80**, 205104 (2009).