

コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン ワークショップ

第一原理分子動力学法プログラム

“STATE-Senri” 入門

森川 良忠

大阪大学 産業科学研究所

〒 562-0047 大阪府茨木市美穂ヶ丘 8-1

産業技術総合研究所 計算科学研究部門

〒 305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 つくば中央第二

March 9, 2005

Abstract

1985年のCarとParrinelloらによる提案以来、第一原理分子動力学法は様々な手法上の工夫がなされてきた。計算機の発展と相まって、現在では半導体エレクトロニクス、触媒、材料科学、生体など様々な分野で重要であるが複雑である系の計算が可能となってきた。本小論では産業技術総合研究所計算科学研究部門で開発している第一原理分子動力学法プログラム“STATE (Simulation Tool for Atom TEchnology)”の概要および簡単な使い方について説明する。

1. はじめに

プログラム“STATE-Senri (Simulation Tool for Atom TEchnology, Senriは大阪大学が位置する千里丘陵にちなんでいる)”は密度汎関数法および擬ポテンシャル - 平面波基底に基づく第一原理分子動力学シミュレーションプログラムである。このプログラムコードは、東京大学物性研究所で開発された擬ポテンシャル - 平面波基底のコードを起源としており、発展の経緯は下に簡単にまとめてある。現在では、ウルトラソフト擬ポテンシャルを用いることにより、シリコンや典型金属のみならず、平面波基底では取り扱いが困難と思われる第二周期元素や遷移金属を含む系についても全電子計算と遜色のない精度で、かつ、より効率的な計算が可能になっている。また、電子状態や安定構造を求めることはもちろん、基準振動解析、反応経路探索、さらには赤外振動スペクトルや高分解能電子エネルギー損失分光スペクトルの計算ができるなど、ナノスケールの物質シミュレーションにおいてきわめて強力なツールとして研究に用いられている。本小冊子ではこのSTATEで使われている手法を概観した後、入力ファイルの作成仕方、計算上の注意点、および、アウトプットファイルの見方などについて必要最小限の説明を行っている。

~1985 H. Ishida (Nihon Univ.): A norm-conserving pseudopotential and plane wave code was developed from scratch at the Institute for Solid State Physics, University of Tokyo.

- ~**1990** K. Kobayashi (National Institute for Research on Inorganic Materials): Modified steepest descent algorithm and Kleinman-Bylander type separable pseudopotential scheme.
- ~**1993** Y. Morikawa (JRCAT-NAIR): Ultrasoft-pseudopotential scheme of Vanderbilt.
- ~**1994** T. Yamasaki (Fujitsu Lab.), K. Kato (Toshiba Co. LTD), and Y. Morikawa: Parallelized on the Fujitsu vector parallel computer VPP500 using VPP FORTRAN, Generalized Gradient Correction, and Spin polarization.
- ~**1995** T. Miyazaki (National Research Institute for Metals): Linear tetrahedron.
- ~**1997** H. Sawada (Nippon Steel), J. Lee (Sogang Univ.), and Y. Morikawa: LDA+U scheme.
- ~**1998** Y. Morikawa: Davidson iterative diagonalization scheme for wave function optimization, Blügel method for charge density mixing, generalized direct inversion for iterative diagonalization (GDIIS) scheme for geometry optimization, and Perdew-Wang-Ernzerhof (PBE96) exchange-correlation functional.
- ~**1999** Z. Fang (JRCAT-ATP): Conversion from FORTRAN77 to Fortran 90 for dynamic memory allocation and from VPP FORTRAN to MPI for parallelization.
- ~**1999** T. Sanada (Thinking Machines), Z. Fang, and Y. Morikawa: Residual vector Minimization Method (RMM) and Real space implementation.
- ~**2000** T. Ikeda (JRCAT-ATP) and T. Uchiyama (Matsushita Co. LTD): Nose-Hoover thermostat and blue moon algorithm.
- 2004~** Y. Morikawa (Osaka Univ.): "STATE-Senri" launched.

2. 主な機能

プログラム STATE は現在のところ以下のような機能を備えている。

- ノルム保存擬ポテンシャル (Troullier-Martins 型) および Vanderbilt ウルトラソフト擬ポテンシャルを用いた計算により、遷移金属や第二周期元素を含む系の計算が、全電子計算とほぼ同じ精度で、かつ効率よく行うことが可能である。ウルトラソフト擬ポテンシャル法での電子密度およびトータルエネルギーは以下のように表される。

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i,\vec{k}} \left(|\phi_{i,\vec{k}}(\vec{r})|^2 + \sum_{lm\tau l'm'\tau'} q_{lm\tau l'm'\tau'}(\vec{r}) \langle \phi_{i,\vec{k}} | \beta_{lm\tau} \rangle \langle \beta_{l'm'\tau'} | \phi_{i,\vec{k}} \rangle \right) \quad (2.1)$$

$$E_{\text{tot}} = \sum_{i,\vec{k}} \langle \phi_{i,\vec{k}} | \hat{T} | \phi_{i,\vec{k}} \rangle + \int V_{\text{loc}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} + E_{\text{H}}[\rho] + E_{\text{xc}}[\rho] + E_{\text{EW}} + \sum_{i,\vec{k}} \sum_{lm\tau l'm'\tau'} D_{lm\tau l'm'\tau'} \langle \phi_{i,\vec{k}} | \beta_{lm\tau} \rangle \langle \beta_{l'm'\tau'} | \phi_{i,\vec{k}} \rangle \quad (2.2)$$

ここで、 \hat{T} は運動エネルギー演算子、 $V_{\text{loc}}(\vec{r})$ は局所擬ポテンシャル、 E_{H} 、 E_{xc} 、 E_{EW} はそれぞれハートリー、交換相関、およびエバルトエネルギーである。エネルギーの最後の項は非局所擬ポテンシャルによる寄与を表す。

- 平面波基底を用いることにより、システムティックな基底関数の拡張が可能、フォースの計算が精度良い、Basis Set Super-position Error (BSSE) が無いなどの利点がある。
- 密度汎関数法に基づく局所密度近似 (LDA)、および、一般化密度勾配近似 (GGA) による計算。
- スピン分極した系の計算。
- 安定性に優れた Davidson 法、および、速度と並列性に優れた RMM (Residual vector Minimization Method) 法の二つの最適化手法を組み合わせた強力な波動関数収束法を備えている。
- 運動エネルギー、クーロンポテンシャルはフーリエ空間、局所および非局所擬ポテンシャル、交換相関ポテンシャルは実空間で計算することにより高速かつ精度の良い計算が可能。

- バンドで並列化することにより、大規模系の効率的な並列計算が可能。
- 原子に働くフォースを計算することにより、構造最適化、基準振動解析、シミュレートッドアニ - リング、有限温度シミュレーションなどが可能。
- 全状態密度及び原子軌道に射影した射影状態密度の計算が可能。
- Tersoff-Hamann の近似による STM 像の計算。
- Fortran90 を用いて配列を動的にアロケートするため配列のサイズをあらかじめ調べる必要がない。
- MPI の使用により多くの計算機上で並列計算可能。

3. プログラムの構造

STATE のソースコードは一つの main プログラム “main.f90” と多数のサブルーチンからなっている。メインルーチンは下に示すような構造になっている。

```
USE MPI
USE parameters
:
Initialization
:
DO MD steps
    :
    Optimization of Wave Functions for fixed atom position
    :
    Molecular Dynamics for atoms
    :
END DO
:
Output
:
END program MAIN
```

3.1. Modules

メインルーチンおよびサブルーチンで使用されている変数のほとんどは m_para.f90 (MODULE parameters), m_pmd.f90 (MODULE PARANOSE, MODULE PARACNST, MODULE PARATOMS MODULE PRSYMBOL), および my_mpi.f90 (MODULE MPI) の三つのファイルに納められているモジュールで定義されている。m_para.f90 内には多数のパラメータ、変数、および配列が定義されている。my_mpi.f90 内には MPI で用いられるパラメータや変数、配列が定義されている。m_pmd.f90 内には主に分子動力学に関連す

るパラメータおよび変数が格納されている。これら、モジュール内の変数をサブルーチン内で使用するには USE 文を用いて以下のようにする。

```
USE parameters, only : kngpm keg, zaj_l, ...
```

3.2. 並列化

下に G-points に関して並列計算する Do ループを示した。各ノードがそれぞれ異なった部分の G 点について計算を行い、最後に 'call my_allreduce' を呼ぶことによって異なったノードで計算した結果を足し合わせることを行う。この Do ループの前に配列が初期化されている必要がある。

```
DO ig=kngp_start,kngp_end
  :
END DO
CALL my_allreduce(...)
```

- MPI subroutine my_allreduce

```
CALL my_allreduce(Length, r_in=..., i_in=...,,,)
```

- MPI subroutine my_bcast

```
CALL my_bcast(Length,
```

```
r1_size=..., r1=..., r2_size=..., r2=...,....., r10_size=..., r10_size=...,
```

```
i1_size=..., i1=..., i2_size=..., i2=...,....., i10_size=..., i10_size=...,
```

```
c1_size=..., c1=..., c2_size=..., c2=...,....., c10_size=..., c10_size=...)
```

4. コンパイル

ソースをコンパイルして実行ファイルを作成するには、makefile, main.f90、および、すべてのサブルーチンファイルを一つのディレクトリ内においておく必要がある。さらに、同じディレクトリの下に作業用ディレクトリ CPPSRC を作成しておく。また、makefile の中でプリプロセッサのフラグを指定する部分をマシンによって変更する必要がある。プリプロセッサのフラグは”P_FLAGS=”という文字列で定義されている。現在のところ日立 SR8000 上では P_FLAGS=-D_SR8K_ -D_VECTOR_ -D_FAST_WAY_ それ以外のマシンでは P_FLAGS=-D_VPP_ -D_VECTOR_ -D_FAST_WAY_ と指定する。そして、”make” とするとコンパイルが始まり、”STATE” という名前の実行モジュールを作成する。

5. 実行環境

ジョブを実行するには以下のファイルが必要である。

STATE	: 実行モジュール
nfinp.data	: 入力ファイル
fort.37	: 第一原子種の擬ポテンシャルファイル (リンクでも可)
fort.38	: 第二原子種の擬ポテンシャルファイル (リンクでも可)
fort.39	: 第三原子種の擬ポテンシャルファイル (リンクでも可)
fort.40	: 第四原子種の擬ポテンシャルファイル (リンクでも可)
fort.45	: 第五原子種の擬ポテンシャルファイル (リンクでも可)
fort.46	: 第六原子種の擬ポテンシャルファイル (リンクでも可)
potential.data	: ポテンシャルあるいは電子密度ファイル。継続ジョブの時必要。
zaj.data	: 波動関数ファイル。継続ジョブの時必要。
restart.data	: 継続ジョブの時必要。構造などの途中結果がかかっている。
GEOMETRY	: 継続ジョブで構造を GEOMETRY ファイルから入力するとき必要。

ただし、第二原子種以降の擬ポテンシャルファイルについては、必要な種類だけの擬ポテンシャルファイルを用意すればよい。

6. 入力ファイル

入力ファイルは以下に示すようなキーワード形式である。

```
! コメント 1
キーワード 1          値 1          ! コメント 2
キーワード 2          値 2          ! コメント 3
&キーワード 3
                      キーワード 4      値 4          ! コメント 4
                      キーワード 5      値 5          ! コメント 5
&END_キーワード 3
.....
INPUT_END
```

”!”は、これより右側はコメントであることを示す。上のキーワード1、キーワード2はそれぞれ値1、値2が代入されることを示している。キーワードと値との間は空白文字がいくつ入ってもよく、また、コメントは無くてもよい。”&”で始まるキーワード3は、”&END_キーワード3”がある行まで複数行を入力に持つ。このようなキーワード入力が続いた後、最後”INPUT_END”で終了する。このキーワード以降にかかれてある内容は無視される。キーワードの順番は、今のところ完全にフリーではなく、サンプルファイルと同じ順番で作るのが安全である。現在、いかに示すキーワードが使用可能である。

ENERGY_CUTOFF_FOR_WAVEFUNCTION Cutoff energy of a plane wave basis set for pseudo-wavefunctions in Ry.

$E_{\text{cut}}^{\text{soft}}(\text{Ry}) = \text{GMAX}^2$, where GMAX is the cutoff wave number for pseudo-wavefunctions. Wave functions are expanded in a plane wave basis set.

$$\phi_{\vec{k},i} = \sum_{\vec{G}}^{|\vec{k}+\vec{G}| \leq \text{GMAX}} \exp\left(i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}\right) \quad (6.1)$$

E_{cut} corresponds to the maximum kinetic energy of the basis set.

ENERGY_CUTOFF_FOR_CHARGE Cutoff energy of a plane wave basis set for localized charge density in Ry.

$E_{\text{cut}}^{\text{hard}}$ (Ry) = G_{MAXP}^2 , where G_{MAXP} is the cutoff wave number for localized charge. The charge density is expanded also in a basis set. (See Vanderbilt representation of the real charge density)

INITIAL_CONDITION : Describes initial conditions of calculations. Choose one of the following conditions.

SCRATCH Start calculations from scratch.

RESTART Restart calculations using previous calculated results.

CHARGE_FFT Calculate partial charge density for STM simulation.

ALDOS_CALCULATION Calculate atom resolved density of states.

The following options are not available now.

CHARGE_MAP

CHARGE_CONTINUE

DOS_CALCULATION

INITIAL_POSITIONS Positions of atoms are read from the following files.

INPUTS Input files.

RESTART Restart file "restart.data", which is provided by preceding calculations.

GEOMETRY_FILE "GEOMETRY" file which is provided by preceding calculations or modified by users.

INITIAL_VELOCITY Velocities of atoms are read from the following files. At present, this key word does not work.

INPUTS Input files.

RESTART Restart file "restart.data".

GEOMETRY_FILE "GEOMETRY" file.

INITIAL_NOSE_THERMOSTAT Specify how to prepare parameters of Nose thermostat.

INITIALIZE Initialize.

RESTART Read from restart file "restart.data".

INITIAL_ACCUMULATOR Specify accumulation of thermostat average.

INITIALIZE Initialize.

RESTART Read from restart file "restart.data".

LEVEL_OF_DEBUG_PRINT Specify print-out level.

0 Lower level.

2 Higher level.

NUMBER_OF_ITERATION_ELECTRON Number of iterations for electronic structure optimization.

TOTAL_STEP Total number molecular dynamics steps for ionic degrees of freedom.

MAX_CPU_TIME Maximum cpu time in seconds.

WAVEFUNCTION_OPTIMIZE Choose one of the following scheme for wavefunction optimization.

DAVIDSON Davidson scheme.

RMM Residual vector minimization method.

The RMM scheme is fast for nearly converged wavefunctions while it is quite unstable for poorly converged wave functions. Therefore, the Davidson scheme should be chosen for first few iterations if you start calculations from scratch and switch to the RMM scheme.

NON_LOCAL_PSEUDO_PROJECT Non-local pseudopotential projection is done in either real-space or fourier space.

REAL-SPACE Real space.

G-SPACE Fourier space.

ENERGY_CRITERIA_CONVERGENCE_ELECTRON Energy criteria for wave-function convergence [in Hartree/atom]. 1.0D-7~1.D-8 is recommended.

POTENTIAL_CRITERIA_CONVERGENCE_ELECTRON Energy criteria for wave-function convergence [in Hartree/atom]. It is obsolete.

MIXING_WAY Choose one of the following scheme for charge density or potential mixing.

SIMPLE Simple mixing.

BROYDEN Broyden scheme.

BLUGEL Blügel scheme.

Broyden or Blügel scheme is recommended.

MIXING_WHAT Choose charge density mixing (**CHARGE_MIXING**) or potential mixing (**POTENTIAL_MIXING**). Charge mixing is recommended for systems which contain large empty space such as surfaces. Potential mixing is sometimes faster for bulk systems.

CHARGE_MIXING_START The number of iteration where the mixture should start. Generally, 0 is recommended.

NUMBER_OF_CHARGE_MIXING Specify the maximum number of preceding charge or potential data used for mixing. 5 ~ 10 for isolated molecular systems. 20 ~ 30 for metallic systems. ~ 50 for spin-polarized transition metal systems.

ALPHA_MIXTURE The mixture parameter. 0.3 ~ 0.8 for easy systems. 0.05 ~ 0.2 for difficult systems such as spin-polarized systems.

ENERGY_WIDTH_STM Energy window for STM-imaging in eV.

EXCHANGE_CORRELATION_TYPE Choose one of the following exchange-correlation energy functional.

LDAPW91 Local density approximation.

GGAPBE Generalized gradient approximation proposed by Perdew, Burke, and Ernzerhof.

RPBE Revised version of PBE.

&SPIN_POLARIZATION Choose one of the following spin states.

PARA Spin-non-polarized calculation.

FERRO Spin-polarized calculation.

ANTIFERRO Anti-ferro magnetic system.

For **ANTIFERRO**, specify symmetry operation matrix which transform spin-up charge density to spin-down charge density and vice versa.

STRESS_CALCULATION At present, stress calculation is not available. Therefore, choose "OFF".

&JOB_TYPE Choose one of the following options for ionic degrees of freedom.

QUENCHING Structure optimization by quenched molecular dynamics.

GDIIS Structure optimization by generalized direct inversion in iterative subspace scheme.

NORMAL_MODE Vibrational normal mode analysis.

NEB Optimizing the minimum energy path by using the Nudged Elastic Band Method. Initial and the final states of reaction paths are required.

FINITE_TEMPERATURE_MD Finite temperature molecular dynamics simulation. For finite temperature md, the following key words should be also specified.

TEMPERATURE_CONTROL Choose one of the following schemes for temperature control.

NEV Micro-Canonical Ensemble.

SIMULATED_ANNEALING

SIMPLE_VELOCITY_SCALING

NOSE-HOOVER_CHAIN_METHOD

ROLLING_AVERAGE_METHOD

GAUSSIAN_THERMOSTAT

GGMT_METHOD

FRICITION_OF_LANGEVIN_EQUATION Friction coefficient used to generate random forces for Langevin MD.

TARGET_TEMPERATURE Target temperature [K].

TOLERANCE_TEMPERATURE Tolerance of temperature [K]. This variable is used when simple velocity scaling or rolling average method are activated.

NROLL Rolling average is taken every nroll MD steps. This short time average of temperate is used to determine a rescaling factor of velocities when **ROLLING_AVERAGE_METHOD** is specified. The typical value is 10.

ANNEAL Annealing factor. Square root of this factor is multiplied by ionic velocitied every MD step when a keyword **SIMULATED_ANNEALING** is activated.

CHARACTERISTIC_FREQUENCY

Characteristic vibrational frequency [cm^{-1}]. This quantity is used to generate the thermostat variables. The vibrational frequency depends on the system but the typical value is $\sim 300 \text{ cm}^{-1}$.

LENGTH_OF_THERMOSTAT_CHAIN Length of thermostat chains. This also means that up to the order of $2 \times \text{NHC}$ Gaussian moments are

controlled when a keyword `GGMT_METHOD` is specified. The recommended value is 4 and 2 for the NHC and GGMT method, respectively.

NUMBER_OF_YOSHIDA-SUZUKI_STEPS

The order of Suzuki-Yoshida integrator which is used to integrate thermostat variables. The available order is 1, 3, 5, 7, 15, 25, 125, and 625, however, 15 is recommended.

NUMBER_OF_INTEGRATION_CYCLES The number of integration cycles for thermostat variables. Usually `NDRT = 1` is enough to integrate thermostat variables stably.

&CONSTRAINTS Specify constraints imposed on ionic degrees of freedom.

NUMBER_OF_CONSTRAINTS The number of constraints achieved using SHAKE and RATTLE algorithms. The available constraints are atom-atom distance (`DISTANCE`), bond angle (`BEND`), difference of distances between three atoms (`DIFF`), and dihedral angle (`DIHEDRAL`).

TIME_STEP Time increment of ions in atomic unit.

TOLERANCE_FORCE Criterion for force in MD in hartree/ a_B .

If the maximum force is smaller than `TOLERANCE_FORCE`, the molecular dynamics is terminated.

SPACE_GROUP_NUMBER 現在のところ、以下の対称性のみ使用可能である。1 ~ 12, 25, 47, 75, 99, 123, 127, 136, 139, 141, 156, 191, 194, 195, 200, 221, 227, 229

BRAVAIS_LATTICE SIMPLE

BODY_CENTER

FACE_CENTER

A_CENTER

B_CENTER

C_CENTER

RHOMBOHEDRAL_CENTER

&UNIT_CELL Specify unit cell parameter.

a, b, c, alpha, beta, gamma Lattice parameters and the angles between axis

&UNIT_VECTOR Specify unit vectors. Key word "**&UNIT_CELL**" and "**&UNIT_VECTOR**" both specify unit cell but in different way. You can choose one of the two ways. If both key-words are specified, program chooses one which appear earlier than the other.

&DIPOLE_CORRECTION Dipole correction for non-symmetry slab calculations.

&NUMBER_K-POINT_MESH_XYZ Specify k-point mesh and sampling scheme.
Choose one from the following sampling schemes.

BROADENING Broadening. Width が負の場合、Methfessel-Paxton によるブロードニング法が採られる。これは金属状態の系に対して全エネルギーおよびフォース共に精度の良い結果を与える。Width が正の場合、二次関数によるブロードニング法が採られる。これは精度が非常に悪いが、フェルミレベル付近に状態がほとんど無い半導体的な系に対してはこちらを採用すべきである。

TETRAHEDRON Linear tetrahedron method.

knx, kny, knz number of *K*-point meshes along each axis

k-point shift shift; no shift→1, shifted→2.

NUMBER_EIGENVALUES Number of bands per one spin state.

&ATOMIC_TYPES In this block of items, number of atomic types and their kinds are specified.

NTYP Number of types of atoms.

IATOMN Atomic number.

AMION Atomic mass in the atomic mass unit.

ZETA Spin polarization. $\zeta = (\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow})/(\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow})$.

&COORDINATES In this block of items, number of atoms and their positions are specified.

NATM, NATM2 Number of atoms in a unit cell.

CARTESIAN Atomic positions are given by Cartesian coordinates in Bohr radius unit.

PRIMITIVE_CELL Atomic positions are given by coefficients of primitive cell vectors.

CONVENTIONAL_CELL Atomic positions are given by coefficients of Bravais lattice vectors.

ninv Obsolete. Specify always "NO".

x,y,z x, y, and z coordinates of atoms.

IWEI Obsolete. Specify always "1"

IMDTYP If "0" is specified, this atom will be fixed. If "1" is specified, this atom will be moved. If "1000+i, i = 1, 2, ..." is specified, this atom will be attached to i-th thermostat.

ITYP Specify kind of atom.

&PDOS_CALCULATION In this block of items, parameters for projected density of states (PDOS) are specified.

- In the first line, specify number of atoms for which you want to calculate their PDOS.
- In the next lines, specify which atoms you want calculate their PDOS by their numbers.
- Specify lower, and upper boundary of energy window, broadening width, and number of energy mesh.

- Specify cut-off radius and broadening width of atomic wave functions for each type of atoms.
- Specify mesh size and number of meshes.

&VELOCITIES Specify initial velocity of each atoms. At present, this item does not work.

7. ジョブの実行

mpixec コマンド等で MPI のジョブとして実行する。STATE を実行する際は入力ファイル名および出力ファイル名を指定する必要がある。

```
mpixec -N 1 -n 1 ./STATE < nfinp.data >& nfout.data &
```

8. 出力ファイル

ジョブの実行により、以下のファイルが作成される。

nfout.data	: 標準出力ファイル。
potential.data	: ポテンシャルあるいは電子密度ファイル。継続ジョブの時必要。
zaj.data	: 波動関数ファイル。継続ジョブの時必要。
restart.data	: 継続ジョブの時必要。構造などの途中結果がかかっている。
GEOMETRY	: 最新の構造がかかれてある。
ENERGIES	: 有限温度 MD シミュレーションの際、各 MD ステップの全エネルギー、温度などがかかれてある。
TRAJECTORIES	: 有限温度 MD シミュレーションの際、各 MD ステップでの原子座標とフォースがかかれてある。

標準出力 nfout.data からは以下のようにキーワードを検索することにより
各イタレーションのエネルギーなど、様々な情報を引き出すことができる。

SCF イタレーションでのエネルギー

```
grep ETOT nfout.data
```

```
ETOT:   1      -3.56165733  0.3562E+01  0.1545E-01
      NSCF NADR          ETOTAL          EDEL          CDEL CONV          TCPU
ETOT:   2     -10.74250991  0.7181E+01  0.8274E-02
ETOT:   3     -13.71029269  0.2968E+01  0.1034E-01
ETOT:   4     -13.83688024  0.1266E+00  0.9885E-02
ETOT:   5     -13.83262576  0.4254E-02  0.7531E-02
...
```

各 MD ステップでのエネルギー、マキシマムフォース、および平均のフォース

```
grep CNVF nfout.data
```

```
CNVF: iter_md, TotalEnergy,  f_max,  f_rms,  edel,  vdel,  fdel
CNVF:   1      -13.90072341  0.026132  0.017845
CNVF:   2      -13.89840527  0.041546  0.027686
CNVF:   3      -13.89811360  0.043779  0.028570
...
```

Projected Density of States

```
grep AO_LDOS nfout.data
```

```
AO_LDOS atm spn  energy  s    px    py    pz    dzz  dxx-yy  dxy  ...
AO_LDOS  1  1  -15.00  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  ...
AO_LDOS  1  1  -14.96  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  ...
AO_LDOS  1  1  -14.92  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  ...
...
```

—