

DFTBバンド構造計算結果はPHASE/0のプリプロセッサの役割を果たす

2016.12. ICSPM24_ハワイ応用物理学会ポスターセッション

DFTB法による硫化カドミウムのSTMシミュレーション

ウルツ構造の硫化カドミウムのバンド構造の計算工程がコンテンツで示され、[DFTBバンド構造計算実行の手引書](#)の計算手順と対になっています。

DFTBバンド構造計算実行の手引書

その他には、CdS(100)-(1x1)表面のSTM像のシミュレーションが掲載されています。

SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

PHASE/0で精密なバンド計算をする前に、予備的な計算を実行できます。PHASE/0で、興味あり、計算したい材料のバンド構造計算が困難か否かを、[DFTBバンド構造計算実行](#)で事前に判別できます。