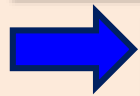


SPMシミュレータはPHASE/0の計算速度をアップさせます

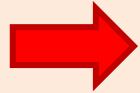
PHASE/0は物質材料研究機構で開発されたフリーの第一原理計算ソフトウェアです

PHASE/0は半導体や金属などの性質を求めることができ、新素材の開発に役立ちます

PHASE/0の問題点：
精密な計算ができるが、計算時間が長い



DFTBソルバで、PHASE/0の入力データを作成



PHASE/0の繰り返し計算回数を減らせます

DFTB(密度汎関数法)ソルバはSPMシミュレータに含まれているモジュールの一つです

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の入力データのうち、次の二つにデータを、DFTBソルバで計算します

- initial_wavefunctions(初期波動関数)
- initial_charge_density(初期電荷密度)

DFTBソルバは、適切な初期データを作成し、計算速度をアップしてくれます

メリットは?

- PHASE/0の繰り返し計算の回数を減らし、収束する速度を上げることが可能です
- 結果として、PHASE/0の計算時間を短縮できます

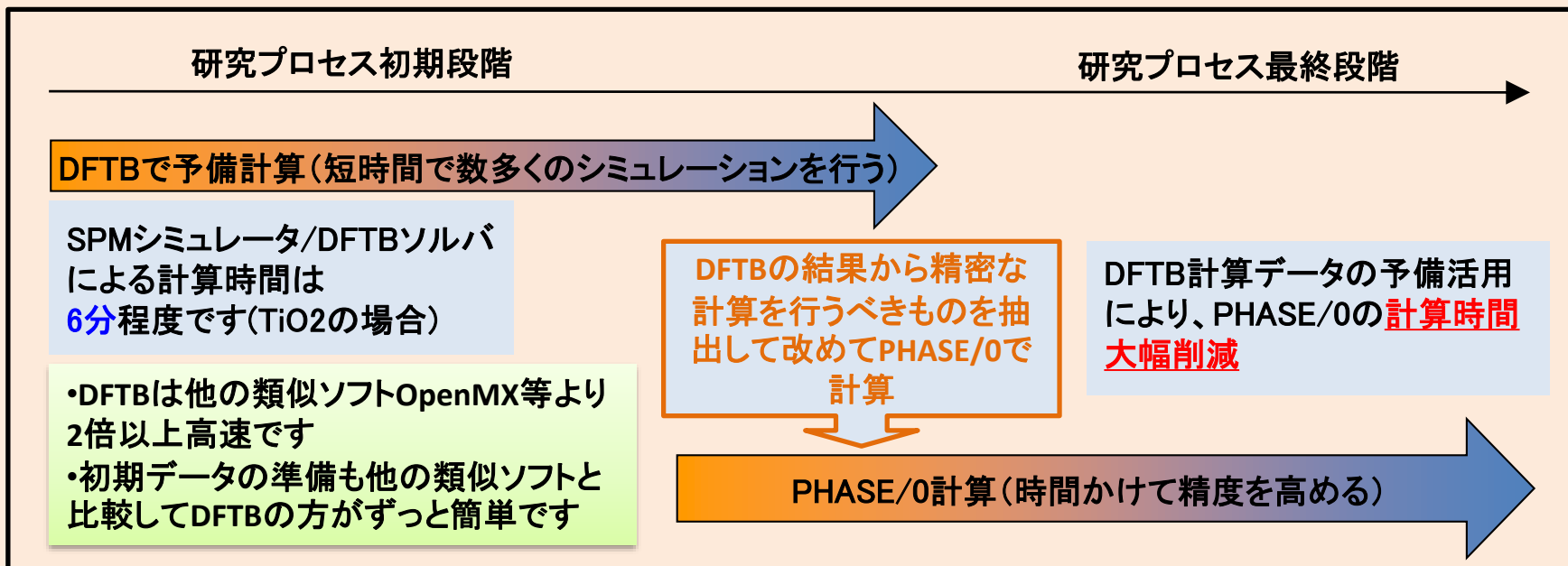
作業の流れ

DFTBソルバで
初期データを準備



PHASE/0で
本格的な計算

SPMシミュレータに付属のDFTB(量子力学的密度汎関数法)ソルバを使って、
第一原理計算PHASE/0の計算時間を大幅短縮



SPMシミュレータのDFTBソルバに付属している**バンド構造計算機能**を利用すれば、PHASE/0をさらにお使い易くなります

ユーザは、PHASE/0での本格的な計算に先立って、SPMシミュレータDFTBソルバで、あらかじめ予備的なバンド構造計算を行うことができます

メリットは?

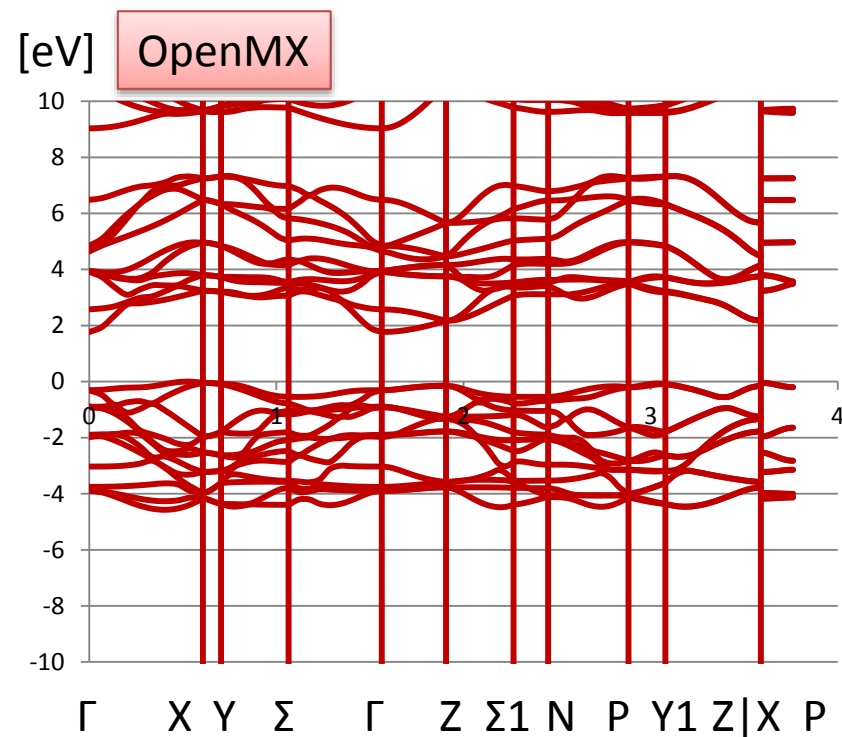
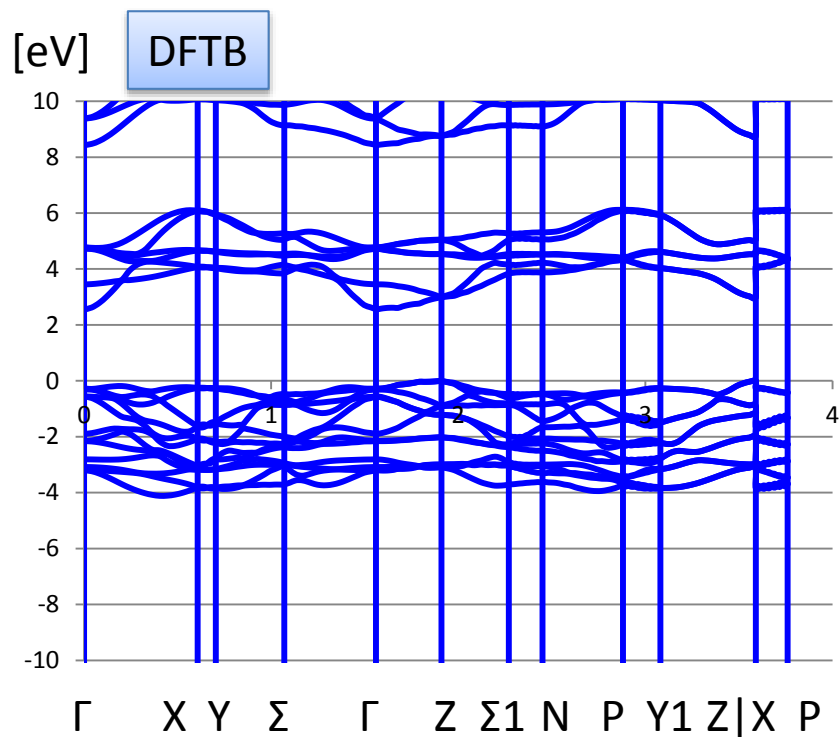
- ユーザは小規模なDFTB計算を高速で行えます
- ユーザは、DFTBソルバで得られるバンド図を参照して、PHASE/0の計算を行えます
- 調べようとしている化合物の第一原理によるバンド構造計算が、易しい問題か、難しい問題かが、DFTBソルバの結果を参照することで予測できます

技術的な観点から見た長所

- 計算速度が比較的早く、計算結果も信頼できます
- Linux上でも動作可能です
- 69種類の元素の量子力学的パラメータが用意されており、事実上、あらゆる化合物のバンド構造が計算可能です

DFTBソルバのベンチマークテスト

DFTBソルバとOpenMXで、酸化チタン(TiO_2)のバンド構造を計算した結果の比較



DFTBソルバは、本来、走査型プローブ顕微鏡画像のシミュレーションを行うためのソフトですが、計算途中の過程で密度汎関数法によるバンド構造計算を行います。このDFTBのバンド計算機能と、OpenMXによるバンド計算の結果を比較したのが上の図です。両者は良く一致していることが分かります。DFTBソルバは、バンド構造出力機能も備えています。

OpenMXは、東京大学物性研究所の尾崎泰助教授が中心となって開発された、フリーの第一原理計算ソフトです。信頼性の高いソフトであることが、広く認められています。