

2016年1月19日 計算科学振興財団 高度計算科学研究支援センター

PHASE/0の特徴

- 物質・材料研究機構の大野隆央先生が中心になって作られたソフトである
- フリー(無料)で提供されている
- 第一原理電子状態計算ソフトウェアである
- 第一原理擬ポテンシャルを使用する
- 波動関数は、平面波展開で表現される
- 平面波のエネルギーの上限値をカットオフエネルギーとして指定する
- カットオフエネルギーが大きいほど計算精度が上がる
- 擬ポテンシャル作成プログラムもフリーで提供されている
- スーパーコンピュータ「京」にインストールされており、企業も時間当たり使用料金を支払えば利用可能

PHASE/0で計算できること

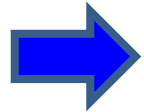
- 結晶構造の状態密度、バンド構造
- 電子系誘電関数
- 格子振動解析
- 結晶表面の構造最適化(リコンストラクション)
- STM像シミュレーション
- 結晶構造の1原子当たりの凝集エネルギー
- スピン分極密度
- 磁場をかけた場合どうなるかも計算可能
- 格子中の点欠陥の生成エネルギー



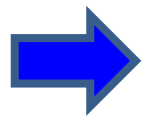
SPMシミュレータと共通の機能も多い

- 構造最適化
- STM像
- バンド構造解析

SPMシミュレータのDFTBソルバで、前もって、いくつかの物理量を近似的に計算



DFTBの計算結果を、PHASE/0の入力データとして受け渡し



PHASE/0の計算時間を短縮
スーパーコンピュータの利用時間を短縮
スーパーコンピュータの利用料金を安くすることが可能

問題点

SPMシミュレータは密度汎関数法、PHASE/0は第一原理計算

- 計算手法が異なっており、共通点が少ない
- 相互で受け渡すデータをどれにするか難しい

SPMシミュレータは擬原子軌道

PHASE/0は平面波展開

- 波動関数の形が異なる

PHASE/0に、SPMシミュレータDFTBを組み合わせる方法の可能性として、以下が考えられる

PHASE/0では、第一擬ポテンシャル作成ソフトとしてCIAO(Code for Investigating Atomic Orbitals)を用意している
CIAOで得られた擬ポテンシャルのデータをPHASE/0の入力として渡している



- DFTBで作成した擬ポテンシャルの情報をデータベース化して、PHASE/0ユーザーに提供してはどうか
→ そうすれば、CIAOで計算する負担が軽減される
- DFTBの擬ポテンシャルデータが、CIAOのデータ書式に合わせられるか調べる必要あり
- DFTBの擬ポテンシャルデータ書式と、CIAOのデータ書式が全く異なる場合、上手く行かない可能性もある

塚田先生のコメント

PHASE/0も密度汎関数法の考え方を使っているのではないか

SPMシミュレータのDFTBソルバは、LCAO法(原子軌道による線形結合法)を使っている

PHASE/0は、平面波展開を使っている

LCAO法



平面波展開法

両者の変換は可能か