平面波基底第一原理計算ソフト xTAPP と 入力支援•可視化ソフト TAPIOCA

吉本　芳英[1]、　吉澤香奈子[2]、　常行真司[2,3]　　[1]鳥取大工応数、[2]東大物性、[3]東大院理

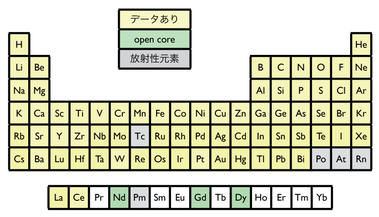
第一原理電子状態計算ソフトウエア xTAPP

手法

- 密度汎関数法（LDA, LSDA, GGA, hybrid）
- ウルトラソフト擬ポテンシャルによるイオンの扱い
- 波動関数を平面波基底展開
- 逐次更新による波動関数、固有エネルギー計算

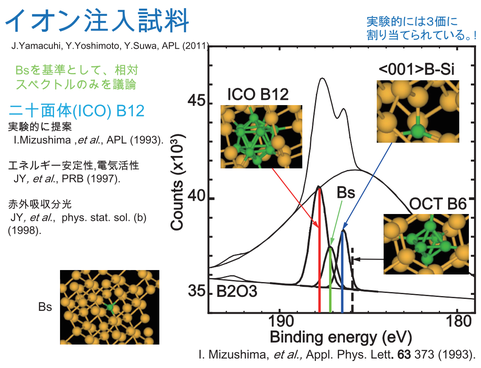
機能

◎ 磁性（LSDA）
◎ バンド計算
◎ DOS, projected DOS
◎ 原子位置と計算セル形状の構造最適化
◎ 外部圧力の取り扱い
◎ hybrid 並列化によるスーパーコンピュータへの対応
◎ hybrid 交換相関汎関数の GPGPU による高速計算
◎ STM 像のシミュレーション
◎ 分子動力学 (NVE, NVT, NPT)
◎ エネルギー障壁
◎ 擬ポテンシャルライブラリ



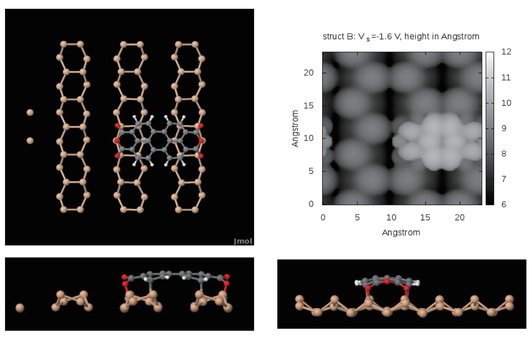
応用例

X 線光電子分光の計算 : シリコン中のボロン
慶応大学　山内　淳氏

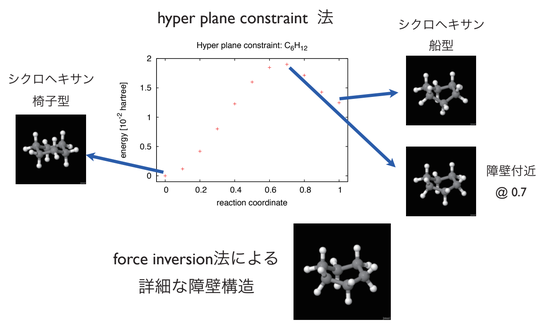


I. Mizushima, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **63** 373 (1993).

STM像：PTCDA/Si(001)

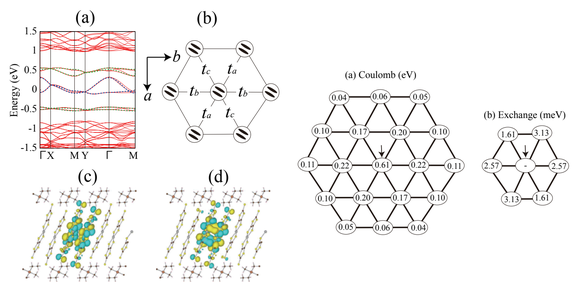


エネルギー障壁計算



格子モデル計算の第一原理化
九工大　中村 和磨氏

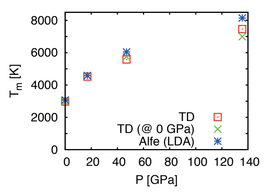
K. Nakamura, Y. Yoshimoto, M. Imada, PRB 86, 205117 (2012)



pressure dependence of melting of MgO

Y.Yoshimoto, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 034602 (2010)

Using thermodynamic downfolding



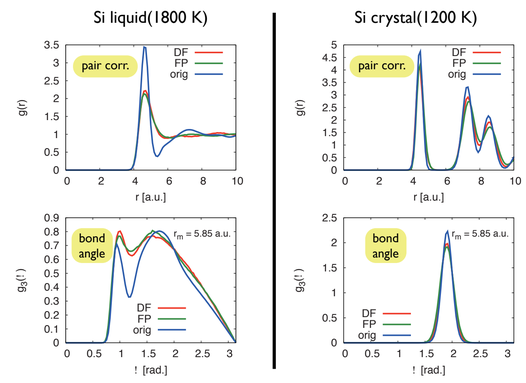
TD: downfolded at each P

TD(@ 0GP): downfolded at P = 0

Alfé(LDA) D.Alfé, PRL 94 235701 (2005) by DFT + coexisting, 432 atoms, NVE

even TD(@ 0GP) produces a good result

with Born-Huggins-Mayer + Morse (2 body)



Y.Yoshimoto, J. Chem. Phys. **125**, 184103 (2006)

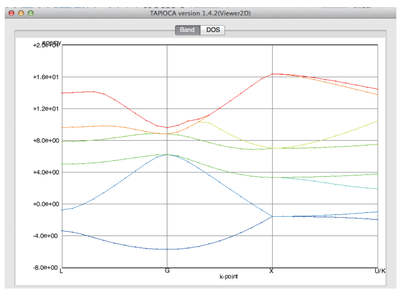
入力支援•可視化ソフト TAPIOCA

機能

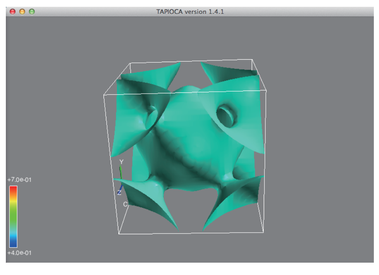
◎ GUI による xTAPP 入力データ作成支援
◎ 結晶構造の表示
◎ 基本セルから拡張セルの作成
◎ DOS やバンドデータのグラフ表示
◎ ３次元データ（密度、波動関数など）の可視化
◎ バンド図 k 点経路の作成
◎ MacOS X, Windows, Linux で動作

○結晶構造や計算パラメータをすべて GUI で設定できる。テキスト形式の入力ファイルの書式を知らなくても良い。
○計算結果の可視化が容易。
○セルの拡張やバンド図 k 点経路の作成など計算に便利な機能がある。
○アンドゥ機能あり。

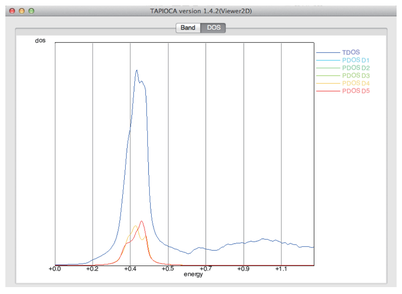
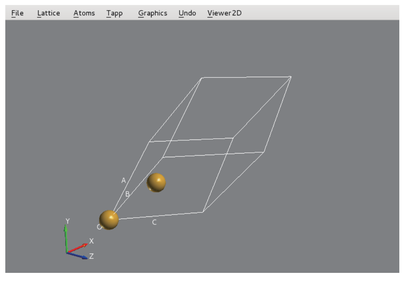
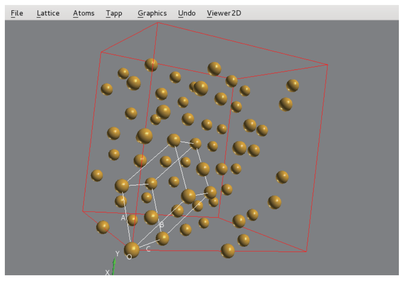
Si のバンド図



Cu のフェルミ面



Cu の状態密度



SI の基本セルから 64 個の立方体スーパーセルの作成