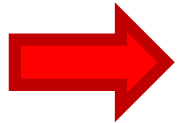


SPMシミュレータとPHASE/0の連携について

SPMシミュレータDFTBソルバとPHASE/0を連携するには、二つの方法が考えられる

(方法1) DFTBソルバにバンド構造計算機能を付与して販売

(方法2) DFTBソルバで、PHASE/0の入力データを作成



二つの方法には、それぞれ、長所と短所がある

方法1 → SPMシミュレータとPHASE/0は独立して運用

方法2 → 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、擬ポテンシャルに関する情報、DFTB計算用パラメータ等は暗号化されているのか、要確認

(方法1)DFTBソルバにバンド構造計算機能を付与して販売

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

長所

- ユーザは小規模なDFTB計算を高速で行える
- ユーザは、DFTBソルバで得られるバンド図を参照して、PHASE/0の計算を行える
- 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る

短所

原子間相互作用パラメータ等は暗号化されているため、DFTBソルバを使うユーザは、物理的な知見の詳細を得られない
ただ、バンド計算の結果が得られるだけで、例えば、擬ポテンシャルがどのような形か、電子軌道をどのような形で近似しているか等の情報は、ユーザには与えられない

技術的な観点から見た場合の長所と短所

長所

- 開発版DFTBソルバには、既にバンド計算機能が実装されている
- 計算速度が比較的早く、計算結果も信頼できる
- 現在、Linux上で動いているが、Windows版への移植も容易
- 原子間相互作用パラメータを暗号化したまま使用可能

短所

- メモリ消費量が激しく、Windowsパソコン上での動作は不向き
- Windows版では、専用のGUIを新たに作った方が良いと思われる
- Linux版では、専用のGUIは用意できないと考えられる
- Linux版で実行ファイルを配布する場合、環境によっては動作しない可能性があり、最悪の場合、AA&S社員が客先に出向いてインストール作業をする必要がある

(方法2)DFTBソルバで、PHASE/0の入力データを作成

PHASE/0の入力データのうち、次の二つにデータを、DFTBソルバで計算してしまう

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

長所

- 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
- 結果として、PHASE/0の計算時間を短縮できる

短所

initial_wavefunctions(初期波動関数)はファイルF_ZAJ、initial_charge_density(初期電荷密度)はファイルF_CHGTで与えられる
これらのファイルはバイナリ形式で、その書式は公開されていない
書式を知るためには、書式を公開してもらるか、PHASE/0のソースコードを知る必要がある

→ PHASE/0は既に商用ソフトなので、技術情報の公開は難しいのでは?