

SPM ユーザーの皆様

皆様には平素より大変にお世話になっております。

Advanced Algorithm & Systems
東陽テクニカ

「PHASE/0 の入力データ」を SPM シミュレータの DFTB 計算を独立実施し作成する、
連携運用ご案内

今後、東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 特任教授 塚田捷先生 と
物質・材料研究機構 大野隆央先生との間で検討されていく事が決まりました。

PHASE/0 は NIMS (物質材料研究機構) によって開発された、
密度汎関数理論に基づいた第一原理分子動力学法計算のためのソフトウェアシステムです。
詳しくは、以下のホームページをご参照ください。

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/event/event.php?id=77>

<https://azuma.nims.go.jp/events/semi2015/semi20160119>

もともと、SPM シミュレータには、
DFTB (密度汎関数法に基づく強結合法) ソルバが含まれています。
この DFTB ソルバによって、あらかじめ、いくつかの物理量を近似的に計算し、
その結果をデータ変換して、PHASE/0 システムの入力データとすることにより、
PHASE/0 の計算の高速化・高機能化が期待できます。
詳しくは、以下のホームページをご参照ください。

https://www.aasri.jp/pub/spm/test/actual-calc_comparison_commentary.pdf

SPM シミュレータと PHASE/0 との連携により、具体的には、以下の相乗効果が生まれると考えられます。

PHASE/0 のプリプロセッサとして SPM シミュレータを使用することにより、
PHASE/0 の計算時間を短縮することが可能です。
これにより、スーパーコンピュータの利用時間を短縮することができます。

現時点で、SPM シミュレータの DFTB ソルバが取り扱える元素は、以下の 27 種となっております。
H、C、N、O、P、Al、Si、Ti、Ru、W、Pt、Au、S、F、Cl、Br、I、Ge、Ga、As、Na、Ag、Bi、Mg、Cu、Li、B
これにより、無機・有機化合物、無機・有機半導体、金属等、様々な物質を調べることが可能となりました。
幅広い分野の方々に、STM、STS、AFM、KPFM シミュレーションをして頂ける環境が整いつつあります。
此れよる DFTB 計算増加数だけ PHASE/0 に入力する事で PHASE/0 計算数を増加させる、効果があります。

DFTB の必要とするシミュレーション計算時間は、おおよそ以下の通りとなっております。

STM シミュレーション：原子数 140 個程度で約 9 分

AFM シミュレーション：原子数 140 個程度で約 170 分

KPFM シミュレーション：原子数 130 個程度で約 440 分

なお、AFM・KPFM のシミュレーション計算時間を短縮するためのバージョンアップ作業が現在進行中で、
今年の 9 月頃には、大幅な改善が見込まれています。

DFTB に使用される原子間相互作用パラメータの開発費は、SPM シミュレータ契約価格に含まれます。更には、購入時には、SPM シミュレータに同梱支給（業界では、AA&S のみ可能と自負致します）が販売条件です。

ご注意

- ・ 原子間相互作用パラメータには暗号化処理が施され、未使用時には暗号顕在化状態にあり、更に、ばら売り、は致しませんのでご注意ください

さらに、平成 28 年度中に、DFTB ソルバの取り扱える元素として、以下の 42 種類の元素が加わります。（合計で、69 種類の元素が使用可能となります。）

これにより、ほぼあらゆる種類の元素化合物がシミュレーション計算可能となります。

遷移金属 V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zr, Nb, Mo, Tc, Re, Rh, Pd, Ir, Y, Sc

ランタノイド系 La, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb

半金属 Se, Sb, Te

アルカリ金属 Li, K, Cs, Rb

アルカリ土類金属 Ca, Ba, Sr

卑金属 Be, Zn, In, Sn, Cd, Hg, Pb

アクチノイド系 Um

Advanced Algorithm & Systems

会社URL <https://www.aasri.jp/>

メールアドレス spm@aaasri.jp