

第一原理電子状態計算プログラムパッケージ xTAPP の開発と応用

Development and application of first-principles electronic structure calculation program package xTAPP

吉本 芳英

Y. Yoshimoto

鳥取大学工学部 応用数理工学科

Department of Applied Mathematics and Physics, Graduate School of Engineering,
Tottori University, 4-101 Koyama-Minami Tottori 680-8552

xTAPP は平面波基底、擬ポテンシャル、密度汎関数法の組み合わせによる第一原理電子状態計算プログラムである。その源流は 1983 年の平面波基底擬ポテンシャル全エネルギー計算プログラム PPSF [1]までさかのぼり、これを基礎骨格とした Ultrasoft 擬ポテンシャル対応パッケージ TAPP [2]から 2000 年ごろ派生したものである。

xTAPP は 2013 年 4 月から GNU General Public License の下で一般に公開されている[3]。xTAPP の主な機能は、

- LDA、LSDA、non linear core correction、Ultrasoft 擬ポテンシャル (f 軌道対応*)
- MPI と OpenMP による hybrid 並列化
- semi local および hybrid 交換相関汎関数、hybrid 汎関数は GPGPU による高速化対応
- セル固定とセル可変による構造最適化 (ストレス計算)
- 第一原理分子動力学 (BOMD)。NVE(velocity verlet), NVT(Berendsen, Stern), NPT(Stern)
- hyper plane constraint 法と force inversion 法によるエネルギー障壁計算*
- バンド図、total DOS、projected DOS の計算
- STM 像のシミュレーション
- Γ 点計算と反転対称性がある場合の計算に対する計算の最適化
- 可視化機能 (TAPIOCA[4]および OpenDX へのデータ変換)

である。(*は近日中に公開)

発表では xTAPP の開発と公開状況について報告するとともに、xTAPP の最新の応用例として Si(001)表面に吸着された PTCDA 分子の STM 像のシミュレーションについても報告する。

この PTCDA 分子は幅広い基板上で薄膜結晶を成長させることができる多環式芳香族分子であって、有機半導体として利用できる。しかし PTCDA を既存の半導体シリコンに統合するべく Si(001)表面に吸着させた時の初期構造の STM 像[5]の解釈には PTCDA が大型で自由度の大きい分子であるため不明な点があり、その第一原理計算による究明が必要である。そこで xTAPP によってさまざまな候補となる構造についてシミュレーションを行い、得られた像を実験と比較した。

[1] 白石賢二(現 筑波大学)など (1983).

[2] 山内淳(現 慶應大学)および TAPP コンソーシアム (1990).

[3] <http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/xtapp/xtapp>

[4] 吉澤香奈子 (物性研究所)、常行真司 (東大理) : 開発中.

[5] T. Soubiron and Nys. B. Grandidier et al., Surf. Sci. 581 (2005) 178.