

ソフトウェアベンダーの取り組み 商用版PHASEのご紹介

2012年10月29日

株式会社アスムス 宇佐見護



PHASEのライセンス

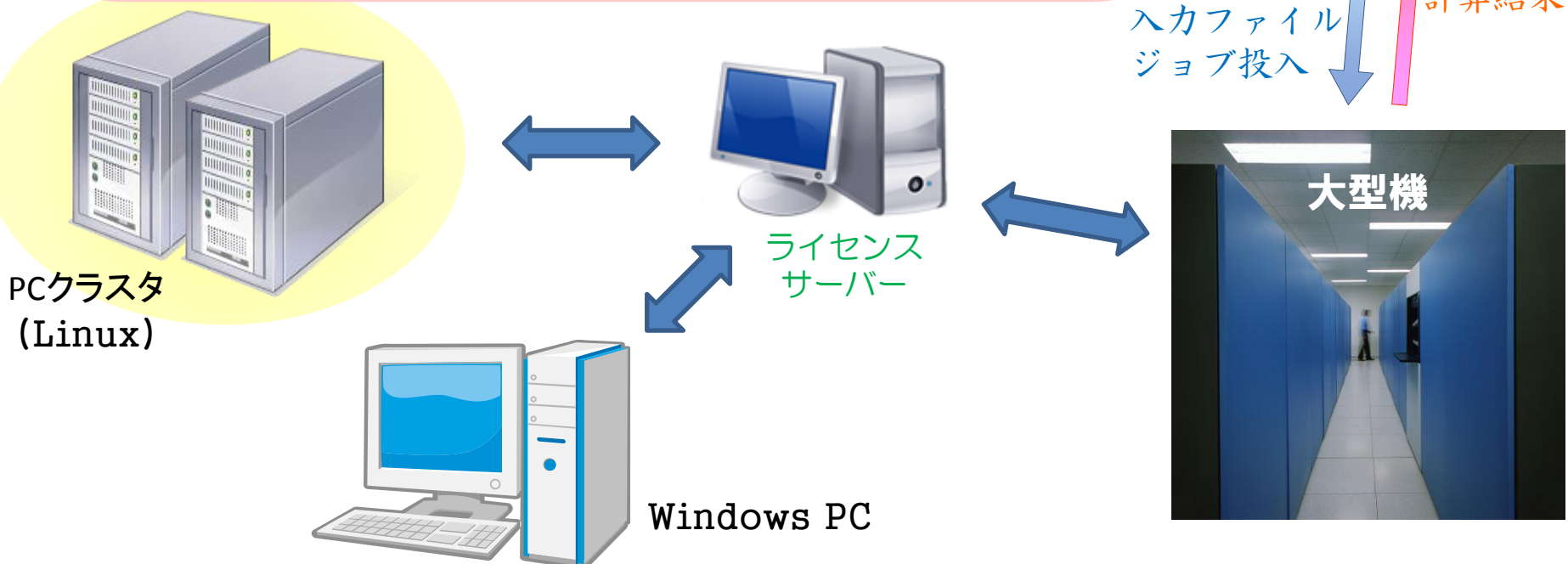
- ダウンロード版
 - 非営利目的の使用に限定。
- 商用ライセンス
 - 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター様に申込み、審査を経て許諾されました。
 - パッケージ化して販売しても良い。
 - PHASEを利用した受託解析を請け負い、対価を得ても良い。

アスムス版の中身

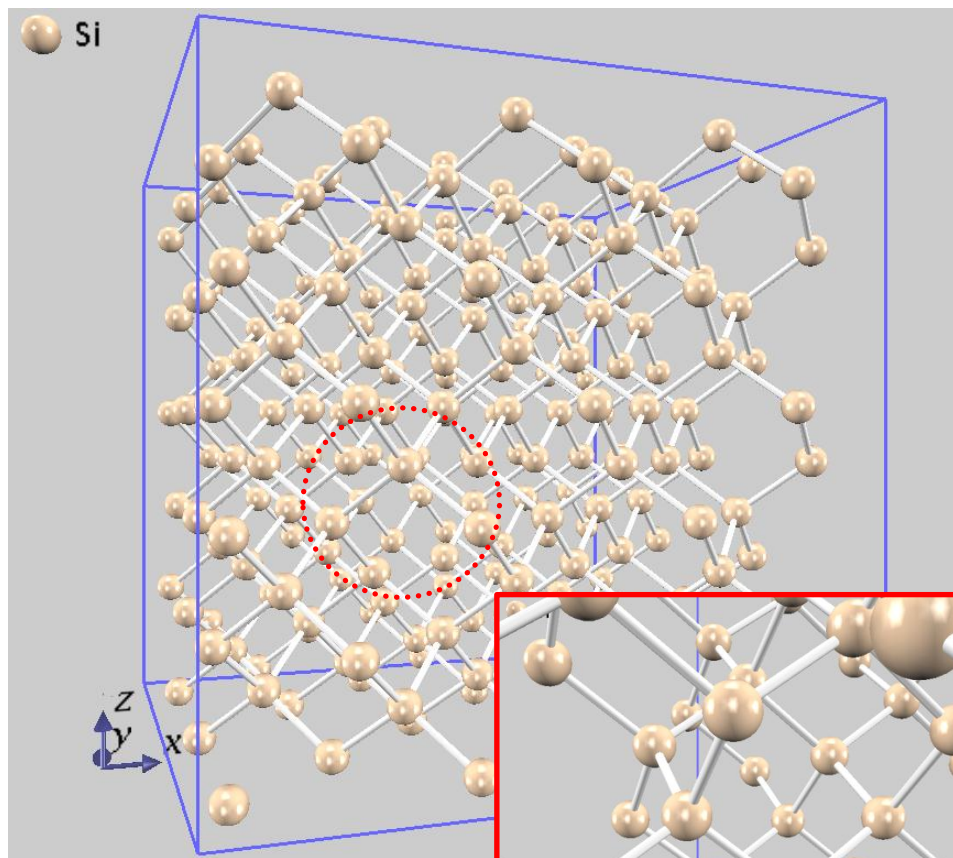
- 独自機能の追加
- 利用方法のサポート
 - 使い方の説明
 - 不具合の発見、修正
- バイナリ提供
 - コンパイル作業からの解放

動作環境

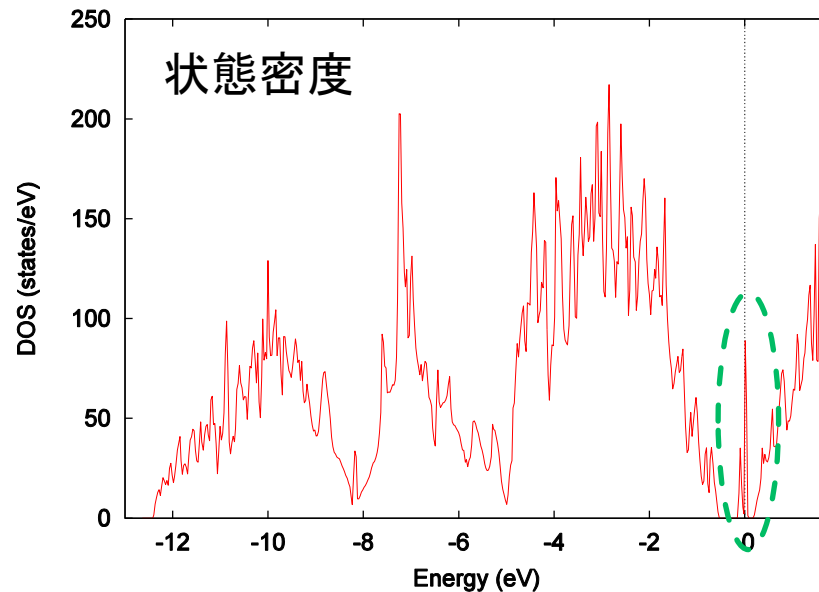
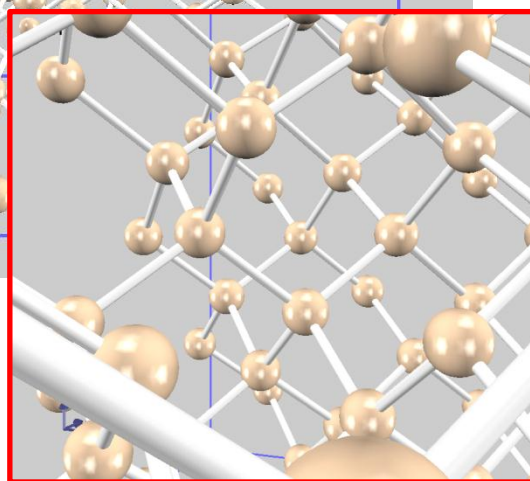
- Linux (64bit); RHEL 5以降
 - 複数の計算ノードを用いた並列計算に対応
- **【対応予定】**Windows (64bit); 7以降
 - ノード内での並列計算に限定



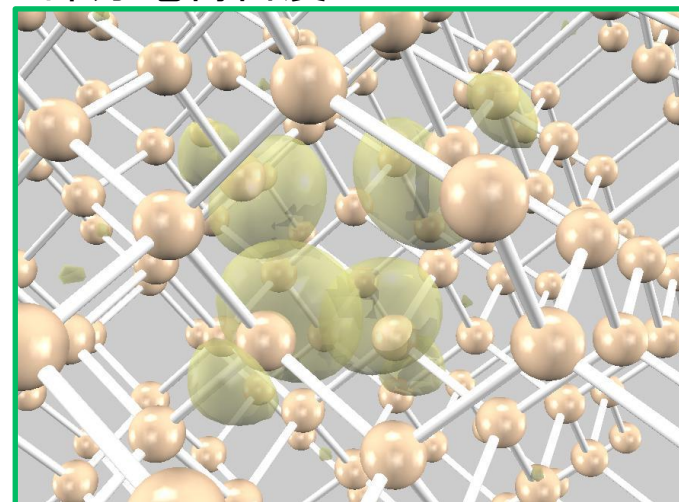
シリコン結晶中の空孔



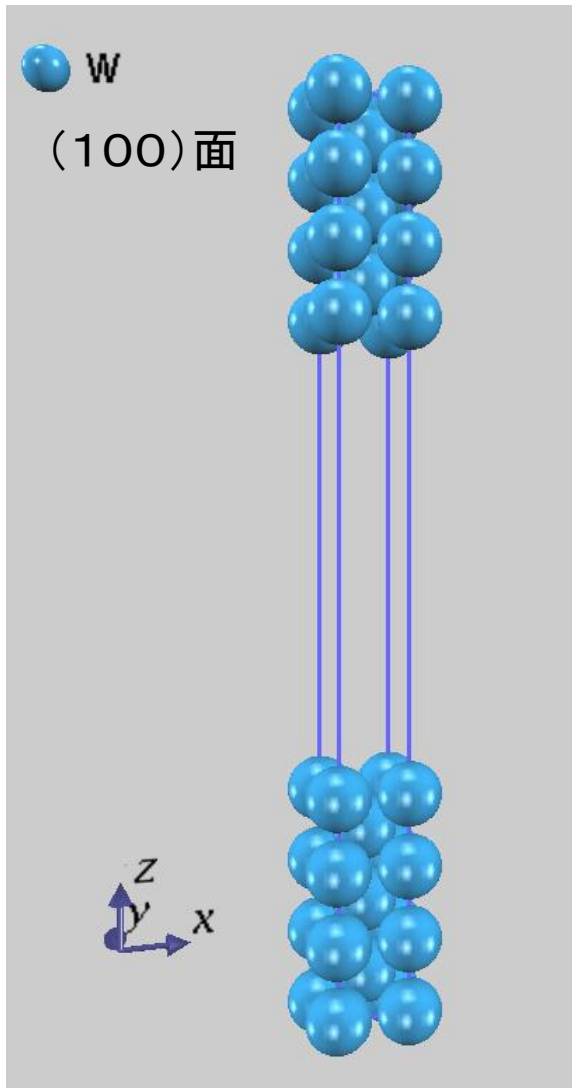
原子欠損のある
シリコン単結晶
(215原子)



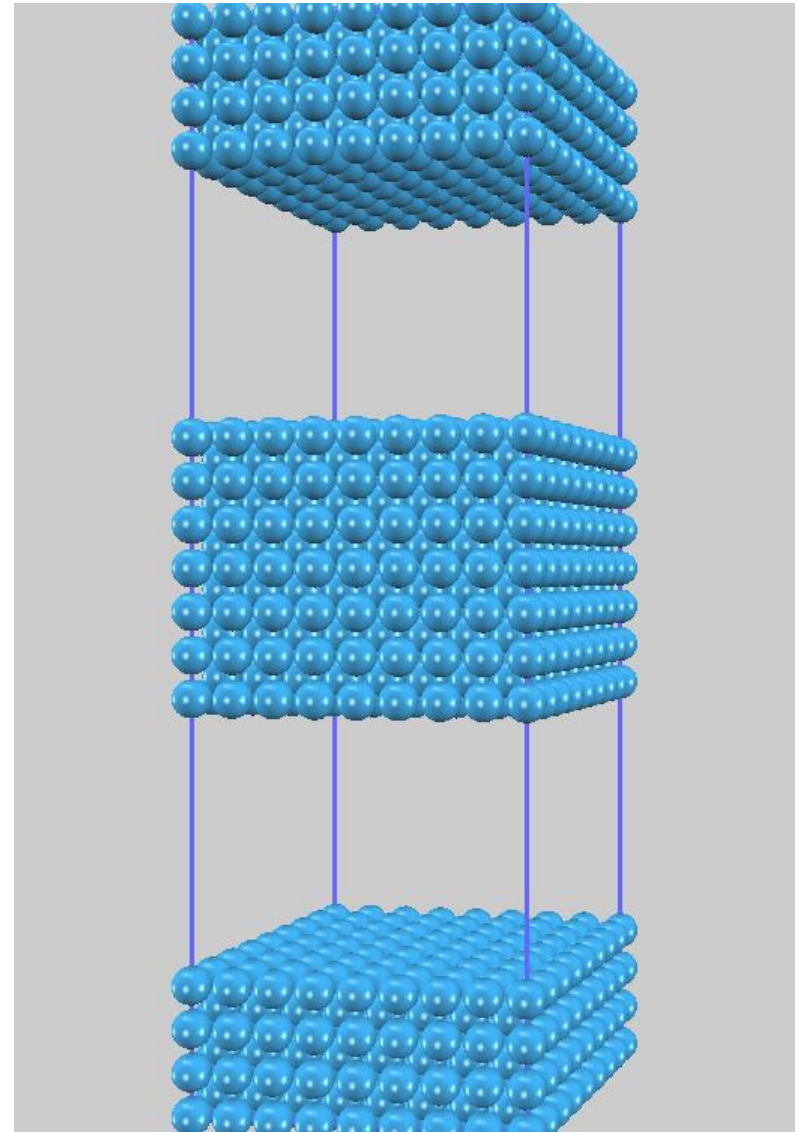
部分電荷密度



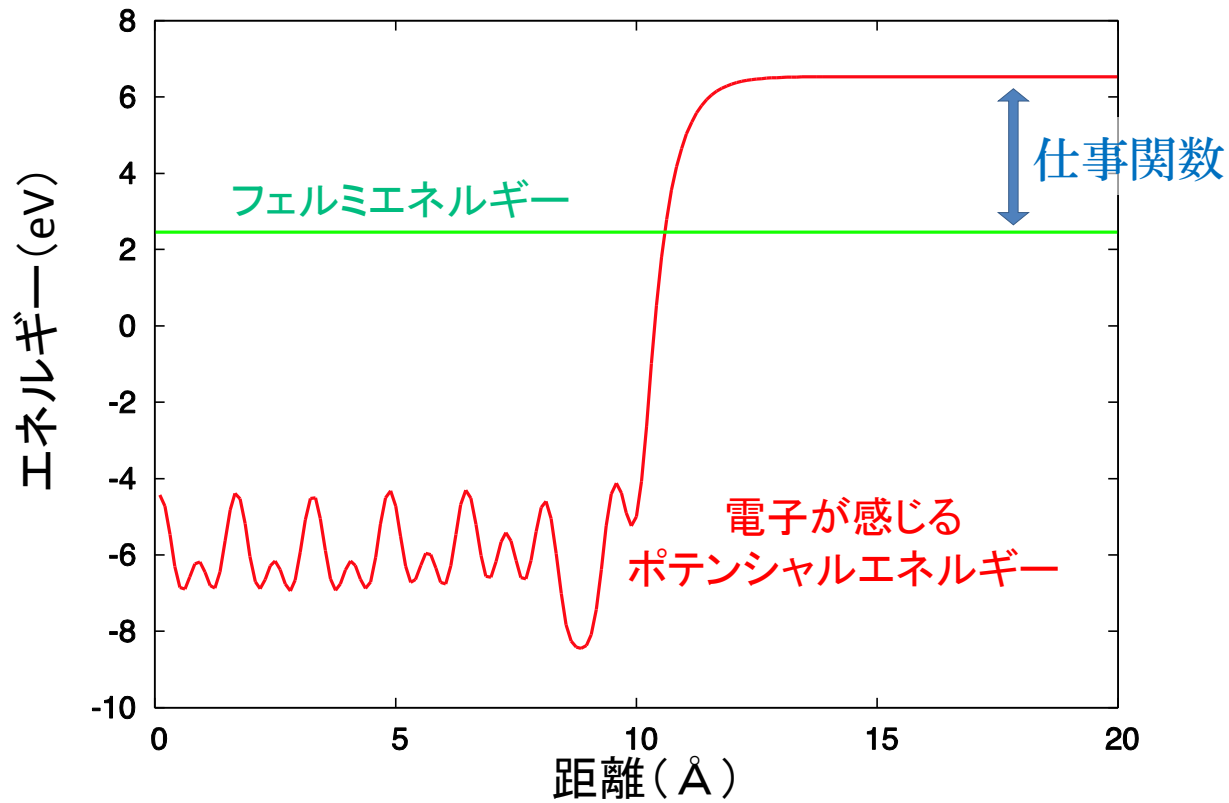
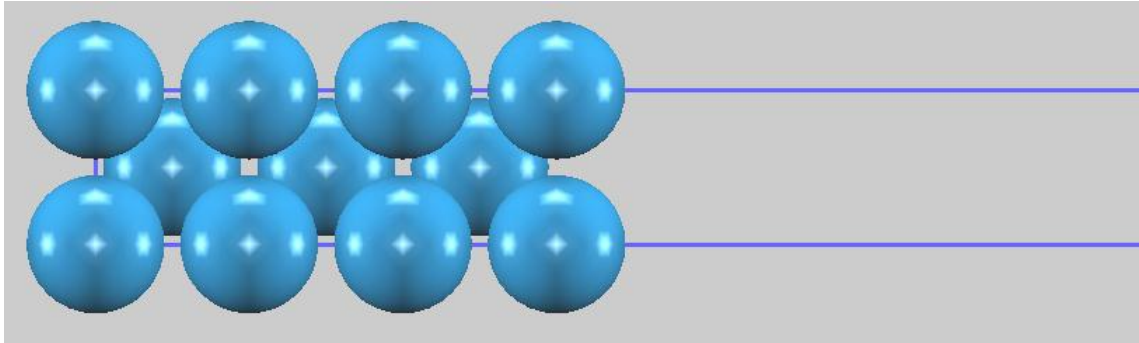
仕事関数：【準備】表面の取り扱い



三次元周期境界
条件下では等価



仕事関数：概要



仕事関数：計算例

- bcc金属の仕事関数の面方位依存性
 - 単純化した議論：面密度の大きい原子面による表面ほど、電子の浸み出しが大きく、したがって仕事関数も大きい。 $(110) > (100) > (111)$

		(110)	(100)	(111)
Nb	理想表面	4.56	3.80	3.34
	構造緩和	4.51	3.56	3.75
	実験値	4.87	4.02	4.36
W	理想表面	4.91	4.22	4.04
	構造緩和	4.74	4.08	4.11
	表面再構成		4.33	
	実験値	5.25	4.63	4.47

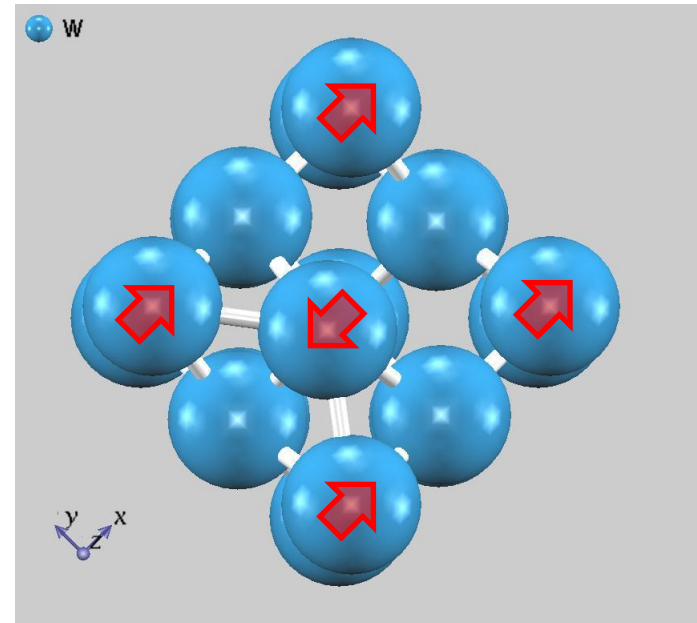
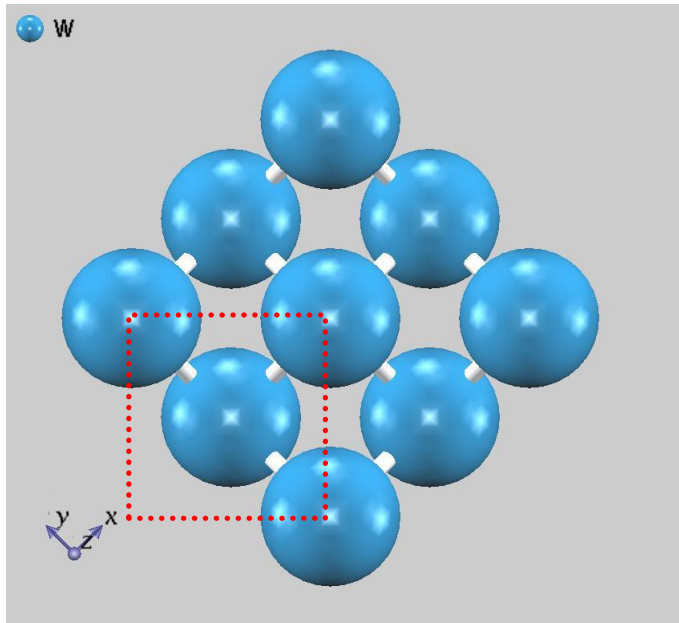
(参考文献)
 塚田捷著
 「表面物理入門」
 東京大学出版会

単位：eV

W(100)の表面再構成

(参考文献)塚田捷著「表面物理入門」東京大学出版会

- Debe-King模型

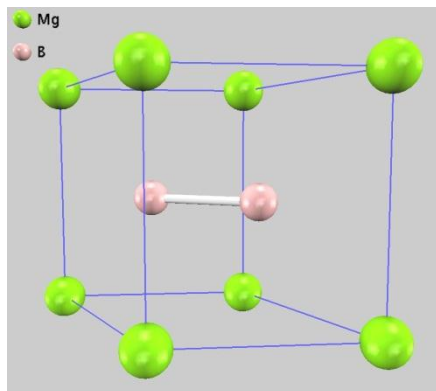


安定

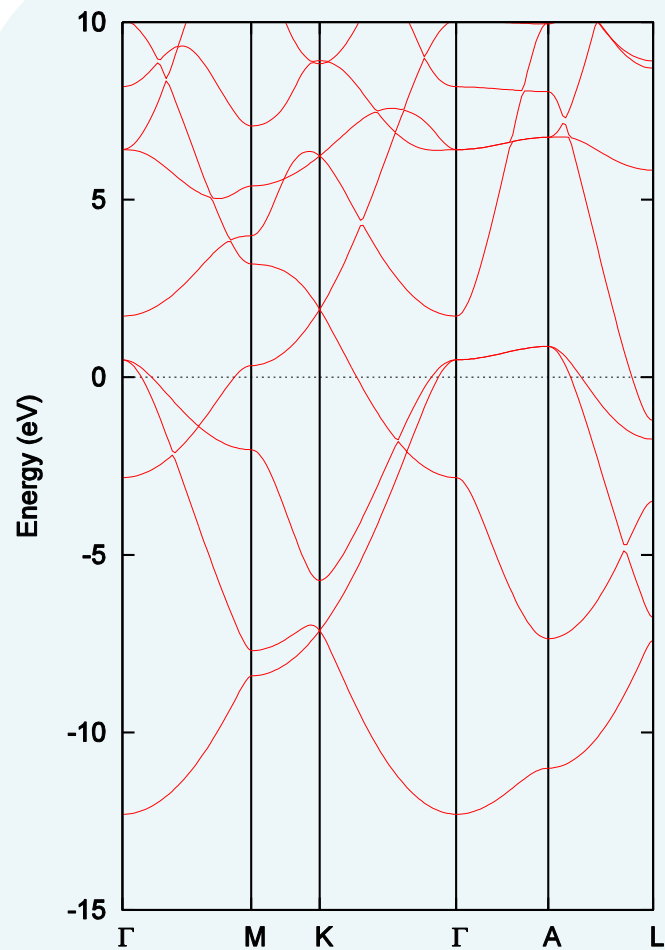
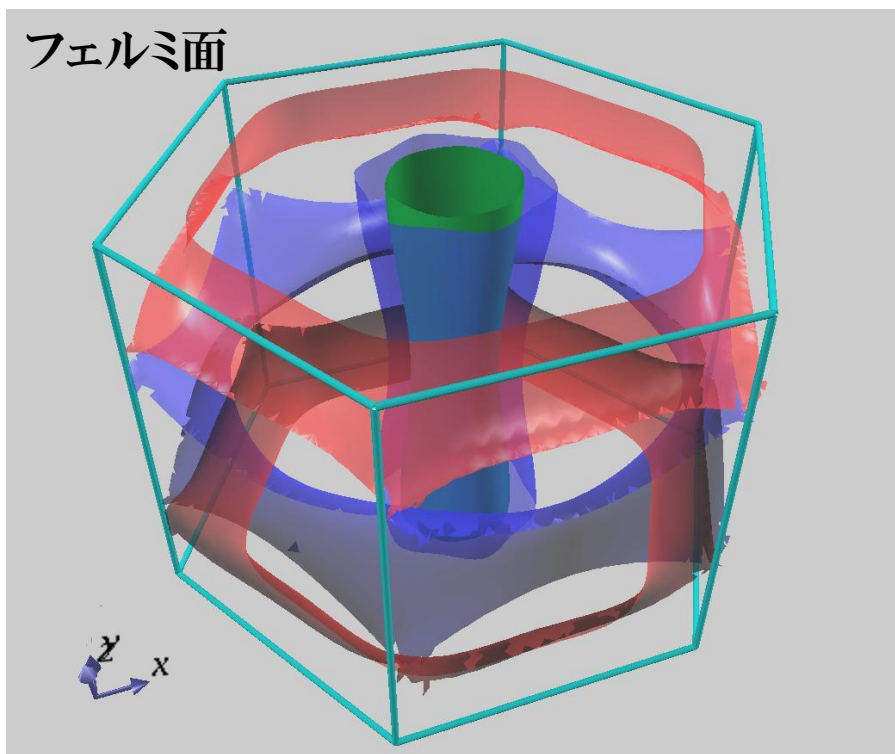
Nb(100)は再構成しない。 Surface Sci. **111**, L701 (1981).

MgB₂のフェルミ面

単位格子



フェルミ面



バンド構造