

第一原理バンド計算ソフトウェアAdvance/PHASE

宇田 毅*

First-principles band calculation software ; Advance/PHASE

Tsuyoshi Uda*

1. はじめに

機械、建築、船舶、航空など、マクロな製品の開発、製造に携わる産業においてはシミュレーションの果たす役割は大きい。というより、シミュレーションなくしてこれらの産業は成り立たないと言っても過言ではない。これに対し、半導体、製薬、化学などミクロな材料開発が重要な部分を占める産業界においてはシミュレーションの活用が遅れていた。しかし、コンピュータの急激な進歩とアルゴリズムの改良によって、十年ほど前から材料シミュレーションも役に立つ道具であるとの認識が広まってきた。実際、CASTEP、VASP、Wien2Kなどの第一原理計算シミュレータ**を導入し材料開発に役立てている企業はここ数年増加の一途をたどっている。ところで、これらはすべて外国産のシミュレータである。21世紀の産業において、根幹的役割を担うと期待されるシミュレータが外国産によって占められるのは憂慮すべき事態である。このような危機意識のもとに、文部科学省は2002年、我が国の科学計算技術の育成と産業界での使用に供するシミュレータの開発を目指したプロジェクト[1]を発足させた。PHASE[2]はこのプロジェクトにおいて開発された第一原理シミュレータである。アドバンスソフト社は、当初よりプロジェクトに参加し開発に携わってきた。また、産業界での広範な利用を目指して、機能拡張と使い易さを特長とする商用版 Advance/PHASE[3],[4]を提供している。

*アドバンスソフト株式会社 技術第2部

2nd Technical Division, AdvanceSoft Corporation

**第一原理計算とは経験値やパラメータを用いず純粋に理論の枠内で解析を行う計算手法のこと。

2. Advance/PHASE の活用分野

表1に材料開発に応用された主な解析例と実施機関を示す。

表1 PHASEを用いた解析例と実施機関

	課題	分野
1	仕事関数	半導体産業、研究機関
2	SiC/SiO ₂ 界面構造	半導体産業 自動車産業
3	Li ₂ 次電池	化学産業、自動車産業 研究機関
4	水素貯蔵合金	研究機関
5	触媒反応	自動車産業、研究機関
6	Na/H ₂ O 反応	原子力研究機関
7	高誘電率材料	半導体産業、研究機関
8	化学反応路	化学産業、研究機関
9	STM AFM	分析機器メーカー 研究機関
10	XPS	分析機器メーカー

3. 機能

Advance/PHASEの機能を以下に列挙しておく。

- ・ 全エネルギー、バンド構造
- ・ 原子に働く力、構造最適化、弾性定数
- ・ 分子動力学
定エネルギー、定温、温度制御は空間指定も可。
- ・ 状態密度
系全体、原子軌道射影、層ごとの局所状態密度、原子の周り（球、ボロノイ多面体）での局所状態密度の表示可。
- ・ 仕事関数

- ・電子誘電関数
- ・ボルン有効電荷
- ・格子振動

ラマン活性、IR 活性の判別、分散曲線、状態密度表示が可能。

- ・格子誘電関数
- ・ピエゾ定数
- ・ヘルムホルツ自由エネルギー
- ・化学反応経路探索

Blue Moon 法

各種の拘束条件を用意

NEB (Nudged Elastic Band) 法

Meta-Dynamics 法

- ・剛体緩和法

基板への高分子の吸着解析のような場合に有効
高分子を剛体とみなした緩和を行うことで吸着
サイトを高速で探索。

- ・DFT+U 法

- ・XPS

- ・STM

表面からの高さに応じた電子密度の 2 次元マップの表示可。

- ・AFM

各点での力曲線の計算。2 次元マップ表示はサポートしていない。

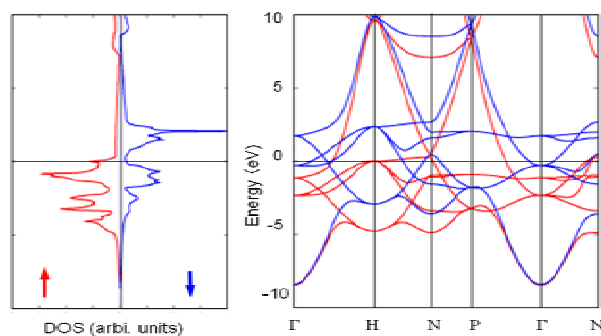


図 1 -Fe の状態密度とバンド構造

一方、図 2 に示した酸化クロム(CrO_2)ではアップ・スピンに対しては金属的であるが、ダウン・スピンに対しては絶縁体となっている。このためスピンのそろった電子線源として用いられる。

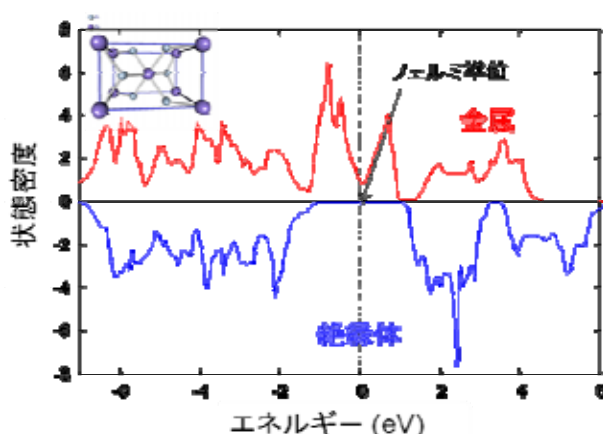


図 2 酸化クロム (CrO_2) の状態密度

4. 計算事例

4.1. 状態密度とバンド構造

図 1 に体心立方強磁性鉄 (α -Fe) の状態密度とバンド構造を示す。図の 2 本の矢印はスピン・アップとスピン・ダウンに対応しており、アップ・スピンの数が多く強磁性となることが分かる。また、点線で示したフェルミ・エネルギーにおいて、状態密度は小さくなっているが、有限の値を持っており金属であることを示している。

図 3 に LiCoO_2 の軌道関数射影状態密度を示す。点線はフェルミ準位を示す。価電子帯は酸素(O)の 2p 軌道とコバルト(Co)の xy タイプの 3d 軌道からできていることが分かる。一方、 $\sim 3.5\text{eV}$ のエネルギー・ギャップを隔てた伝導帯は Co 原子の x^2-y^2 タイプの 3d 軌道からできている。また、ここでは図示していないが、同様に軌道射影状態密度を計算することによって、全状態密度の $-17 \sim 19\text{eV}$ 付近の準位は $\text{O} 2s$ 軌道、 10eV 以上の準位は $\text{Li } 2s$ 軌道からできていることが分かる。さらに図から各原子の

価数を予測することができる。O 原子は 3.5eV 付近の空の軌道に成分を持っているため-2 より少し大きく、また、Li 原子

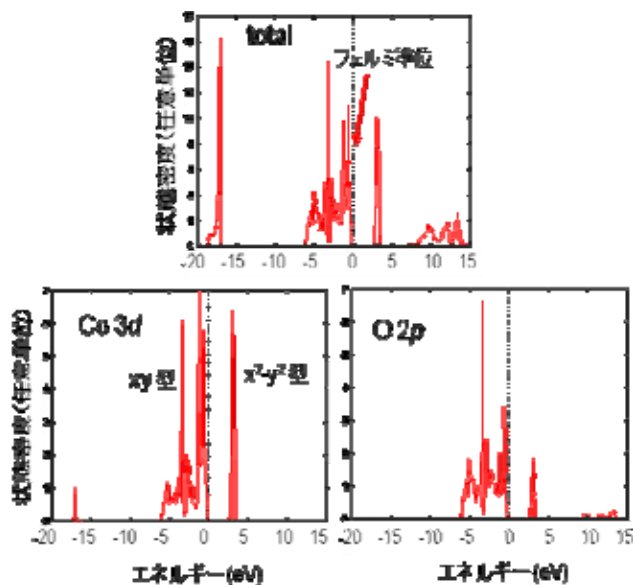


図 3 LiCoO₂ の軌道関数射影状態密

はかなり高い位置にあるため、ほとんどイオン化して+1 に近いと考えられる。Co 原子は 3 つの xy 軌道に 6 個の電子が詰まっている。一方、孤立原子は (3d)⁷ (4s)² と 9 個の電子を持っているので +3、ただし、+3 では電荷の中性条件が満たされないために +3 よりやや小さな値と予測される。

図 4 に SiC/SiO₂ 界面構造の層分割局所状態密度を示す。(a)に構造面図、(b)~(c)は矢印で示した層の、また(d)の局所状態密度は SiC バルクの全状態密度に殆ど一致する。界面に近い層(c)ではギャップが大きくなり始めるとともに界面でのダングリング・ボンドの状態がエネルギー0 の位置に見え始める。界面(b)での局所状態密度にはダングリング・ボンドに起因するギャップ準位が顕著に認められる。このダングリング・ボンドは構造図(a)において界面層原子の右から 3 番目の Si 原子に存在している。SiC はパワーデバイス材料として研究開発が進められているが、図から見ても明らかなように、界面での原子密度が異なっている。このため界面でのボ

ンドを過不足なく繋ぐことが難しく、Si/SiO₂ 界面に比べ界面準位が多く発生する原因となっている。

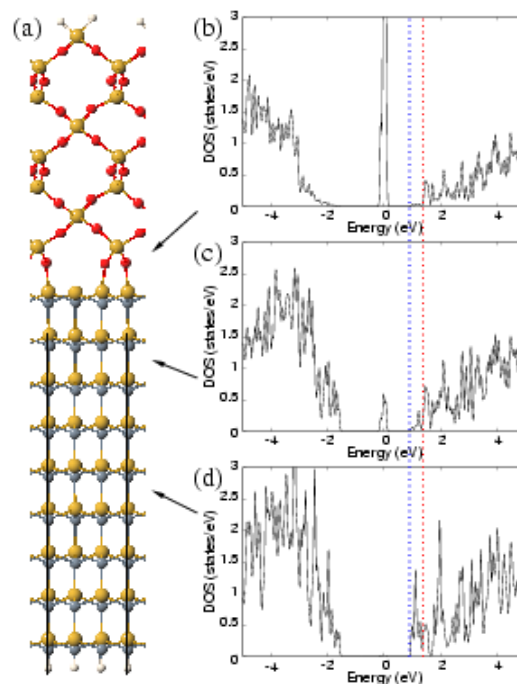


図 4 SiC/SiO₂ の層分割状態密度

図 5 に空孔(vacancy)を持つ Si 結晶の空間分割局所状態密度を示す。空孔は図 5 の上段左の構造図に白ぬき点線球で示したように、Si64 個につき 1 個 (15.6%) 存在する場合の計算である。上段右図は全状態密度で、高濃度の空孔が存在するにもかかわらず、全体にわたって結晶 Si の状態密度に近い。大きな違いはエネルギー・ギャップの中に 2 つのギャップ準位が生じていることである。中段左図は空孔の周りの局所状態密度を示しており、ギャップ準位だけが強調されている。中段右図に示した空孔の隣りの Si 原子周辺の局所状態密度では、これらのダングリング・ボンド起因の準位が減少し、バルクの状態密度が増大している。以下、下段左、下段右と参照 Si 原子が空孔から遠くなるにつれこの傾向は顕著になり、空孔から最も遠い原子の周りの局所状態密度ではダングリング・ボンド起因の準位は殆ど消滅している。

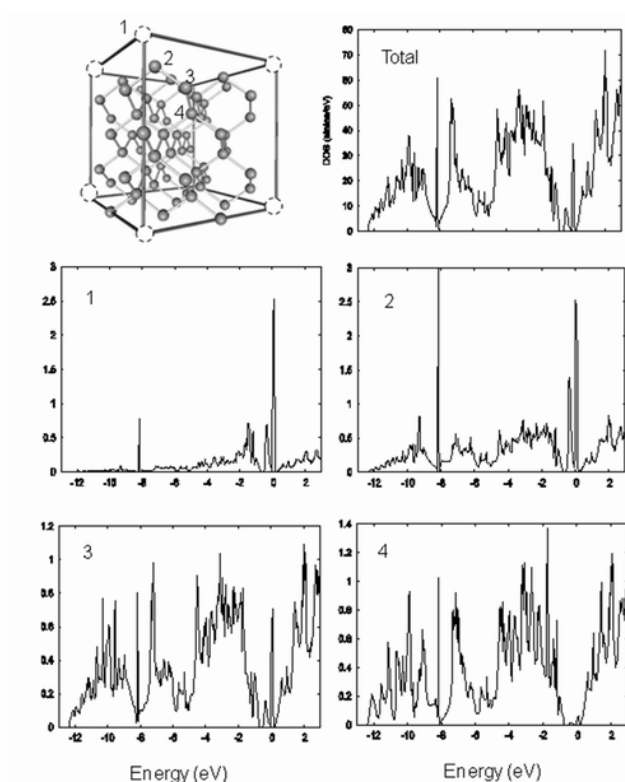


図 5 Si の原子分割局所状態密度

今回の計算では空孔による格子緩和は行っていない。したがって、4 個のダングリング・ボンドは、対称性より 1 重と 3 重に縮重した 2 つの準位に分裂する。図のギャップ準位も明らかにこの条件を満たしている。

ところで、現実の Si 結晶には単独の空孔(single vacancy)より対になった空孔(di-vacancy)の方が圧倒的に多い。ダングリング・ボンドの数が 8 から 6 に減少するからである。では、3 個、4 個と空孔はより集まった方が安定かというところでもないらしくこれらの中途半端に集まった空孔は見られていない。ダングリング・ボンドの数を減らすだけでなく応力の発生が少ない構造が実現されるためと考えられる。

図 6 に格子欠損を持つ GaN の状態密度を示す。上段は Ga 欠損の場合、下段は N 欠損の場合を示す。Ga、N は結晶中ではそれぞれ +3、-3 に帯電している。図で点線はフェルミ準位、また鎖線はフェルミ準位を起点とした完全結晶でのバンド・ギャップの位置を示している。Ga 欠損では価電子帯のトップにホール・バンドが形成されている。ホール・バ

ンドの状態密度の積分値は 3 となっており、Ga が 3 個の電子を引き連れて抜けていくという素朴な描像が成り立っている。一方、N 欠損では 3 個の電子を置き去りにするので、伝導帯に 3 個の電子が詰まった n 型半導体となると予想されるが、状態密度の積分からは伝導帯には

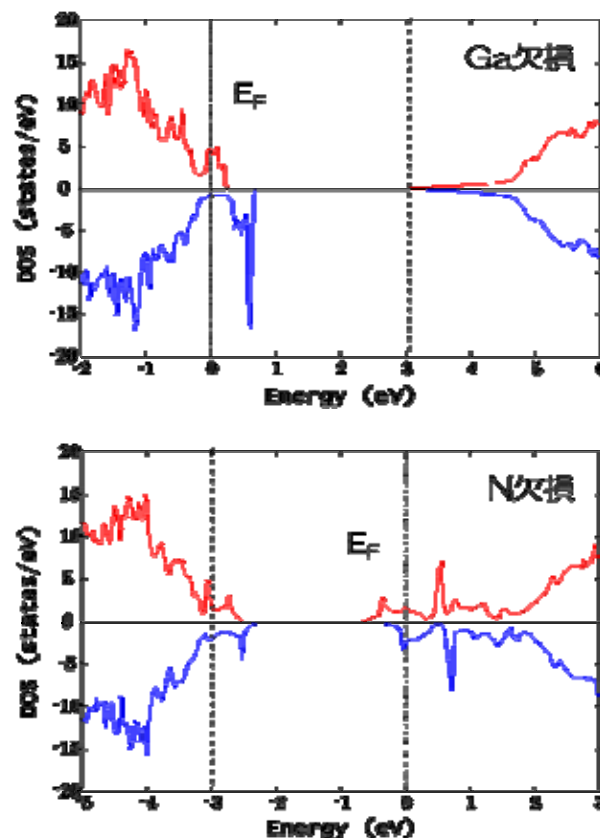


図 6 欠損原子を持つ GaN の状態密度

1 個の電子しか存在しないことが分かる。残りの電子は価電子帯のトップに收容されている。N の抜けた領域は周りの Ga の正電荷のために正に帯電している。このため、ギャップ準位が形成され、この準位を 2 個の電子が占めていると考えられる。実際、これらの電子は図 7 に示したように N 欠損位置に局在化している。図 7 はこの構造が一種のエレクトライド[5]とは局在化した電子が陰イオンの代わりに結晶を安定化している物質群の総称である。

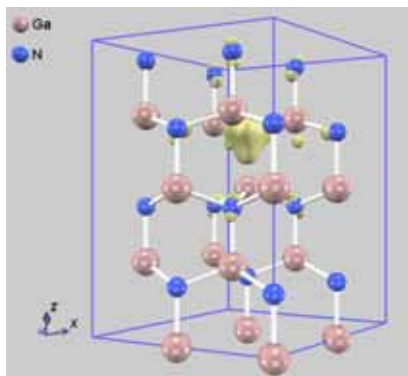


図 7 N 欠損試料の価電子帯トップの電子密度

4.2. 弾性定数

ヤング率(Y)、ポアソン比(P)、体積弾性率(B)の定義とシリコンの弾性定数を表 2 に示す。

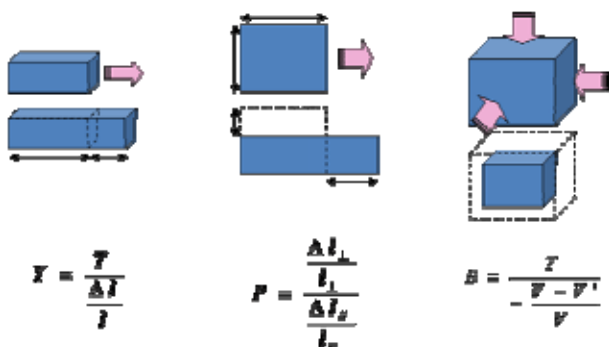


表 2 シリコンの弾性定数

	PHASE	実測値
ヤング率 Y(GPa)	124.0 (-5.4 %) 127.3 (-2.9 %)	131.1
ポアソン比 P	0.264 (-5.4 %) 0.271 (-2.9 %)	0.279
体積弾性率 B (GPa)	88.0 (-11.3 %) 92.5 (-6.8 %)	99.2

Advance/PHASE による計算値で上段が GGA によるもの、下段が LDA による結果である。格子間隔、凝集エネルギーなどたいていの物理量は GGA の方が精度がよいことが知られているが、弾性定数は LDA の方が実測値に近い。

LDA が GGA より精度がよいとされるもう一つの例はグラファイトの層間距離である。実際 GGA

ではグラファイトは不安定で積層しないが、LDA では実測値に近い値を与える。しかし、これは偶然のたまものである。グラファイトの層間距離はファン・デル・ワールス力が支配的で、DFT ではこの効果を考慮していない。したがって、DFT の範囲でグラファイトが結合しないのはむしろ正しい結果であって層間距離が再現されたのは、結合エネルギーが過大評価され、原子間隔が過小評価されるという LDA の欠点が多たまファン・デル・ワールス力と同じ効果をもたらしたにすぎない。

4.3. 仕事関数

図 8 に Na の仕事関数の計算結果を示す。上段に示した表面をモデル化したスラブ構造において表面に平行な面でのポテンシャルの平均値を高さ Z に対してプロットしたものである。表面は Z ~ 30Å にある。表面を境にポテンシャルは急激に立ち上がり ~ 40Å で平らな真空準位に漸近する。

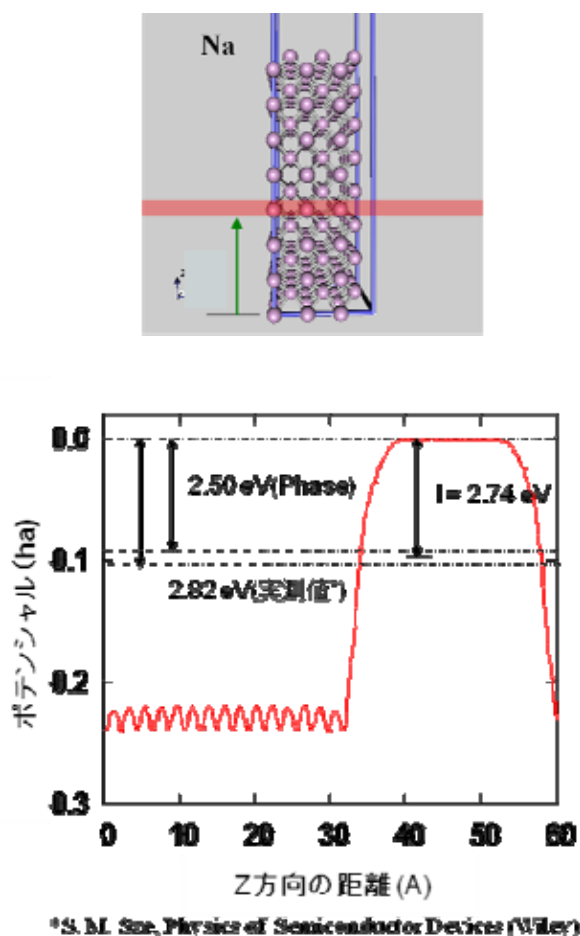


図 8 Na の仕事関数

この例での真空準位はたまたま 0 に近いが、一般には周期境界条件を採用しているため 0 ではなく正の値となる。しかも試料の膜厚と真空層の厚さに依存する。しかし、図に示したように試料内部と真空層で十分平らな部分が生じるような厚いスラブ構造を用いれば、真空準位からフェルミ準位を差し引いた仕事関数はバラツキの少ない良く定義された値を与える。例として、表 2 に TaN についての真空層厚依存性を示す。真空層厚が 5Å 異なると真空準位には ~1eV の変化がもたらされる。しかし、この差はフェルミ準位の変化によって相殺され、仕事関数は小数点 2 桁の精度で一致する。一方、その絶対値は、一般に実測値より小さく評価される。フェルミ準位は 1 電子レベルに関するもので、DFT 理論の枠内では必ずしも正しい値を与えない。仕事関数に関する不確かさは真空準位ではなく、フェルミ準位にあると考えられる。つまり、バンド・ギャップが過小評価されるのと同じ原因によるものであり、たいていの問題ではこの事実には注意すれば、定性的に間違った結果を引き出すことは少ない。しかし、図 8 に示した Na の仕事関数における 0.3eV の差は、かなり微妙な問題を含んでいる。図に示したように、Na 原子の最外殻 3s 準位のエネルギーは 2.74eV である。Na が表面から真空中に脱離していく場合、3s 準位は仕事関数の計算値より大きいのでイオン化しないが、仕事関数の実測値より小であるためイオン化するという定性的に異なる結果になってしまう。

表 3 TaN の真空準位，フェルミ準位，仕事関数の真空層厚(L)依存性，試料の膜厚は 20Å

試料	(a)	(b)
計算値	L = 15Å	L = 20 Å
真空準位 (eV)	4.130	3.041
フェルミ準位(eV)	0.623	- 0.470
仕事関数 (V)	3.507	3.511

4.4. 分子動力学計算

エネルギー一定の条件での分子動力学計算の例として、Si のフォノン振動の計算結果を図 9 に示す。図中左のように点での LO フォノン振動に対応する変位を初期値として与え、動力学計算をした結果が右図である。電子系の全エネルギー（ここでは古典分子動力学に従ってポテンシャルエネルギーと呼ぶ。）と原子の運動エネルギーを足した全体のエネルギーはよく保存されている。また、振動の周期はラマン散乱から得られた測定値をよく再現している。この結果は派生的に得られたものであり、フォノン振動を求めることが目的である場合は原子に働く力を用いる方法が効率的で精度もよい。

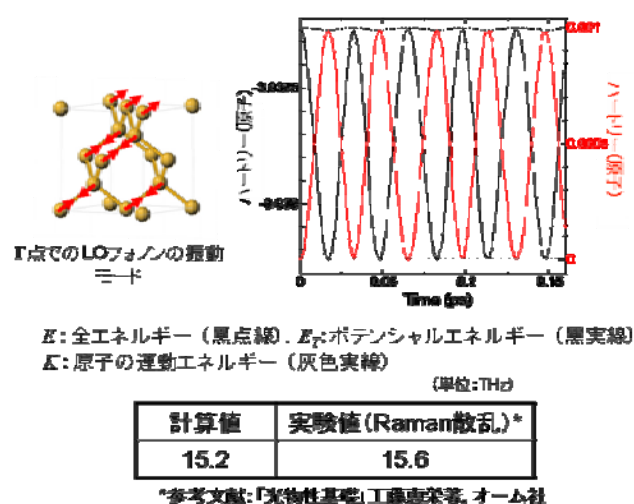


図 9 Si のフォノン振動

温度制御分子動力学の例としてアニーリングの計算例を図 10 に示す。初期構造は水素(H)をよく吸収する金属合金にできるだけ H を吸収させ、絶対零度で構造最適化を行ったものである。金属原子は ~100 個、H 原子は ~200 個である。系全体に熱浴をつけ 10 ps での分子動力学計算を行った。~2.5 ピコ秒程度で熱平衡状態に達していることが分かる。平衡後の全エネルギーは少数系を反映して変動幅は大きいけど平均値は初期エネルギーより低くアニーリングの効果が認められる。

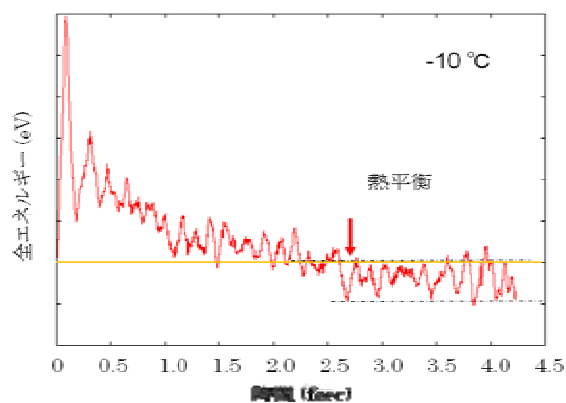


図 10 水素吸蔵合金のアニーリング効果

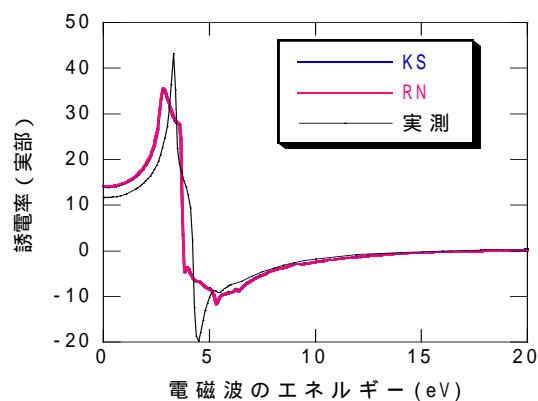


図 11 シリコンの誘電関数

4.5. 電子誘電関数

図 11 に Si の誘電関数を示す。上段が虚部、下段が実部である。虚部の測定値には $\sim 3.5\text{eV}$ と $\sim 4.5\text{eV}$ にそれぞれ、E1、E2 と呼ばれる 2 つのピークが存在する。計算値の誘電関数には E1 ピークは顕著に認められずショルダーを成すだけである。E2 ピークはよく再現されているが、ピーク位置は $\sim 0.7\text{eV}$ 程低エネルギー側にシフトしている。DFT 固有の問題がここでも露呈されている。このため、実部にあらわれるピークも低エネルギー側にシフトする。したがって、静誘電率は 14.1 と実測値 12 より大きく評価されている。

方解石の複屈折率を表 3 に示す。方解石が複屈折率を持つのは光の電場ベクトルの方向によって屈折率が異なるためである。

表 4 方解石の屈折率

	計算値	実測値
n_o	1.659	1.658
n_e	1.483	1.486

また、図 12 上段に結晶構造、下段に方解石を透して見た文字の写真を示す。

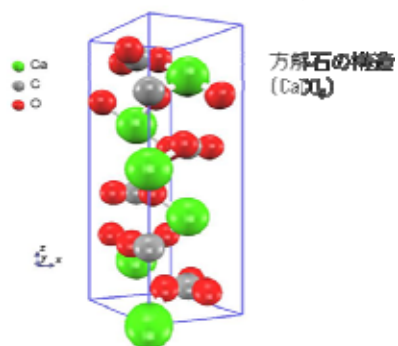
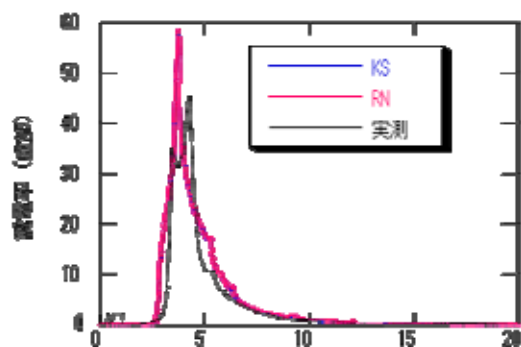


図 12 方解石の複屈折



4.6. ボルン有効電荷

平面波を基底関数として用いる場合、原子の価数を決めることは困難である。ある原子周辺のどこまでの空間を件の原子に属するかを任意性なしに決定することができないからである。一方、局在軌道を基底関数とする場合、価数の定義は明らかである。Mulliken 電荷と呼ばれる各原子に属する電子数と原子核価数との差で決めることができる。

平面波基底の場合、不確定無に定義される電荷として、ボルン有効電荷、あるいは動的電荷がある。各原子を だけシフトさせたときの分極 P を第一原理計算で求め、

$$P = \Delta Z^* \quad (1)$$

から有効電荷 Z^* を求める方法である。ところで、分極の向きはシフトの向と平行とは限らないので Z^* は一般にはテンソル量になる。

図 13 に LiFePO_4 の結晶構造、表 5 に有効電荷を示す。複雑な結晶構造を反映して、非対角成分が残っている。

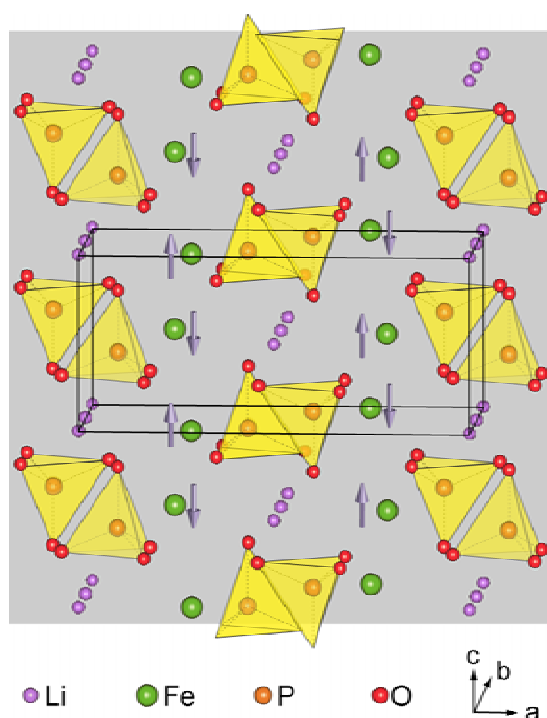


図 13 LiFePO_4 の構造

表 5 LiFePO_4 の有効電荷テンソル

ボルン有効電荷テンソル			
Li	0.94	0.24	0.05
	0.14	1.05	0.09
	-0.02	0.01	1.30
Fe	2.45	0.00	-0.09
	-0.01	2.46	-0.02
	-0.02	0.00	2.00
P	3.30	-0.01	0.11
	-0.02	3.42	0.00
	-0.16	0.00	3.32
O(1)	-1.34	0.02	-0.18
	0.02	-1.19	0.00
	-0.25	-0.01	-2.25
O(2)	-2.30	0.01	0.19
	0.00	-1.27	-0.01
	0.02	0.00	-1.38
O(3)	-1.53	0.34	0.26
	0.50	-2.29	-0.07
	0.27	0.04	-1.49
O(4)	-1.53	0.34	0.26
	0.50	-2.29	-0.07
	0.27	0.04	-1.49

4.7. 格子振動

格子振動は 4.4 に述べた分子動力学計算によっても原理的には計算可能である。図 9 の例では 点での LO フォノン振動に対応する変位を初期値として与えたために、1 つの振動数しかあらわれていないが、ランダムな変位を与え長時間分子動力学を行ったあとで、各原子の変位のフーリエ変換を行えばその他の基準振動も求めることができる。ただし、この方法では多大な計算時間を要するだけでなく初期変位の中に、ある基準振動の成分が運悪く含まれていない場合にはその基準振動は得られない。

もっと簡便で厳密な方法は各原子に x, y, z 方向にそれぞれ微小変位を与え、各原子に働く力のマトリックスを対角化することである。また、ユニットセルを大きくしたスーパー格子を用いることによ

って、フォノン分散やフォノンの状態密度を求めることができる。図 14 に結晶 Si のフォノン分散と状態密度を示す。

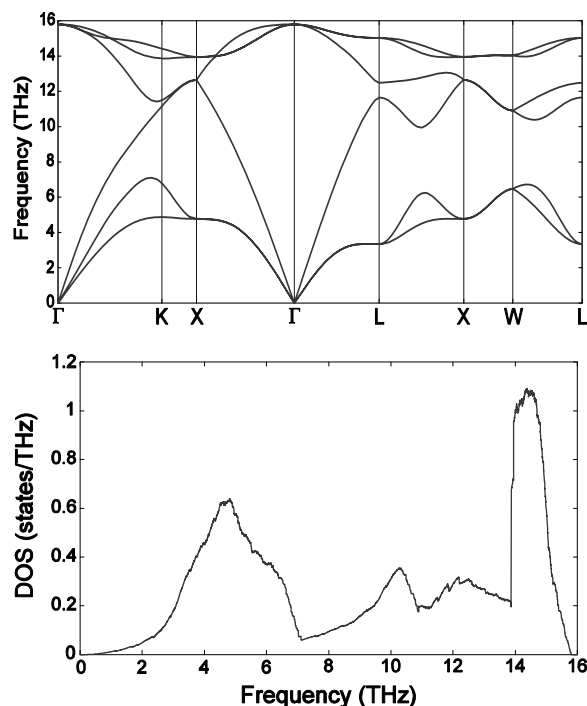


図 14 Si のフォノン分散（上）と状態密度（下）

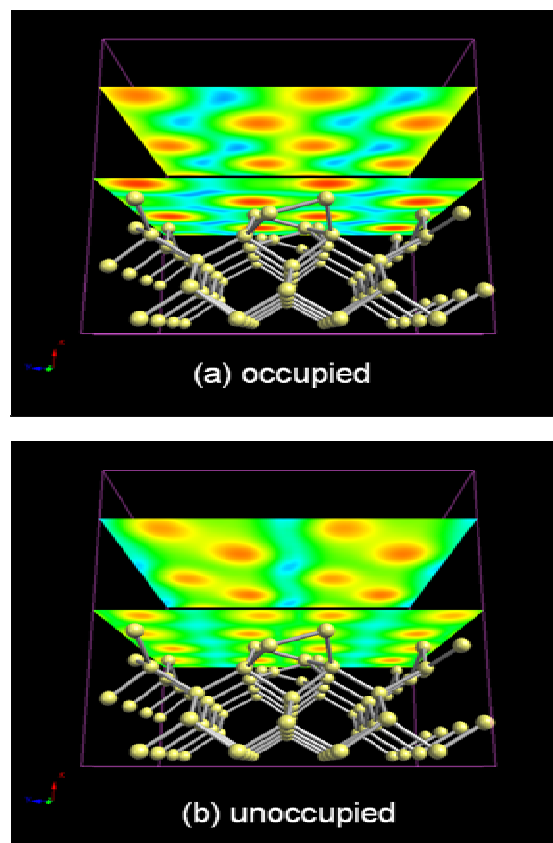


図 16 Si(001)表面-p(2x2)

4.8. 格子誘電関数

ボルン有効電荷と格子振動数より、格子系の誘電関数を求めることができる。図 15 に酸化セリウム (CeO_2) の格子誘電率（黒色）を示す。また、白色領域は電子誘電率を示す。格子誘電率に関する計算値と実験値はよく一致している。一方、電子誘電率は、すでに述べた理由によって計算値の方が実験値に比べ 25%ほど過大評価されている。

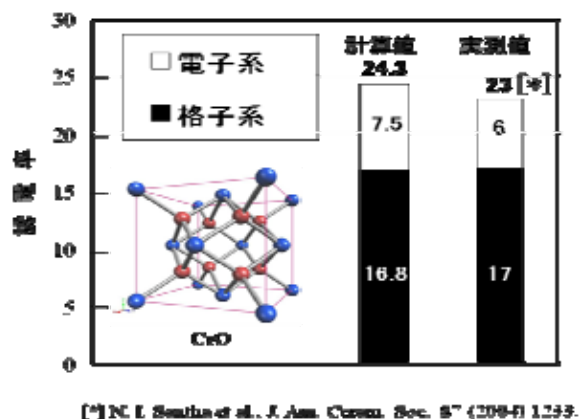


図 15 酸化セリウム(CeO_2)の誘電率

4.9. STM

Si(001)表面の p(2x2)再構成の STM 像を図 16 に示す。上段(a)は Si 基板に対する探針バイアスが 1.0V の場合、下段(b)は-1.0V の場合の像である。つまり、(a)では電子が基板より探針にトンネル電流として流れ込み、(b)では探針から基板へと電子が流れ込む測定条件になっている。また、それぞれの図に表示した 2 枚の STM 像は探針が基板表面から ~ 0.7Å と ~ 3.5Å の高さにある場合の像に対応している。なお、実験における探針の高さはトンネル電流値の大きさによって間接的に制御されており、絶対値そのものが制御されているわけではない。図(a)では探針の高さによらず、表面から突き出た原子（アップ・ダイマー）が観測されている。これに対し、図(b)では探針が表面に非常に近いときは飛び出た原子が観測されているが、3.5Å 程度はなれると、ダイマーの位置ではなく、原子の存在しない溝上に像が見える。STM 像から表面構造を解釈するにあたって、シミュレーションが必要となるよい例であ

る。

4.10. XPS

励起光 $h\nu$ の照射によって穴のできた内殻電子のフェルミ準位から計った束縛エネルギー E_c と測定される光電子の運動エネルギー K の間には以下の関係がある。

$$h\nu = K + W + E_c \quad (2)$$

ここで、 W は仕事関数である。2.2 で述べたように擬ポテンシャルでは内殻電子状態が扱えないため、 E_c の解析に対しては 1 章で紹介した Wien2K のような全電子計算シミュレータを用いる必要があると考えられる。しかし、Scheffler らは内殻に正孔のある擬ポテンシャルを用いることによって全電子計算によらずとも E_c の解析が可能となること示した[6]。すなわち、原子 I を正孔のある擬ポテンシャルに置き換えた系の全エネルギーを E_T^I として、初期状態と終状態でのエネルギー保存則を書き下すと、

$$h\nu + E_T = K + E_T^I \quad (3)$$

となり、 K を求めることができる。ただし、この方法での K にはかなりの誤差が含まれる。ところで我々が知りたいのは K の絶対値ではなく、原子 I と原子 II の内殻エネルギーの相対的シフトである。すなわち、

$$\begin{aligned} \Delta K &\equiv K^I - K^{II} = -(E_c^I - E_c^{II}) \\ &= -(E_T^I - E_T^{II}) \end{aligned} \quad (4)$$

Scheffler らは、この方法によって Si(001)表面-(2x2)再構成のレベル・シフトの実験結果[7]がよく再現されることを示した。

図 17 に表面が B で覆われた NbB₂ の構造と B 1s 内殻レベル・シフトの表面からの距離依存を示す。図 17 から明らかなように 2 層目の B 層ですでにバルクのレベル・シフトに近づいている。バルクの内殻レベル・シフトに対する表面内殻レベル・シフトは -1.74 eV である。また、表 6 に表面内殻レベル・シフトの Wien2K による全電子計算の結果と実測値を示す[8]。Advance/PHASE による計算結果は全電子計算の結果より実測値に近い。これは偶然のことと思われるが、正孔を持つ擬ポテンシャル法によっても全電子計算に匹敵する精度での解析が可

能であることを強調しておきたい。

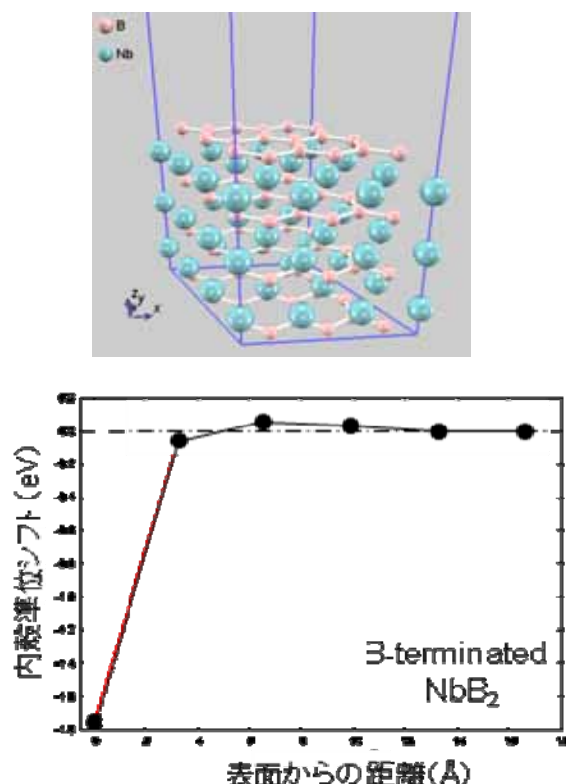


図 17 B 終端化された NbB₂ の構造（上段）と内殻レベル・シフト（下段）

表 6 B 終端 NbB₂ の表面原子内殻レベル・シフト

PHASE	Wien2K	実測値
-1.74 eV	-1.85 eV	-1.6 eV

5. 残された課題と将来計画

これまで紹介したように、Advance/PHASE に用意された機能を駆使すれば、多くの問題に対応できるが、まだまだ不十分な点も残されている。以下に課題とその対策について述べる。

4.1 で Fe の強磁性が再現できることを示した。しかし、磁化軸方向の解析はできない。磁化の方向は電子スピンと電子の軌道角運動量との相互作用によって決まる。スピン 軌道相互作用機能は現在開発中であり、半年後にはリリース予定である。

4.10 に XPS の解析を紹介したが、元素と正孔が存在する内殻軌道ごとに擬ポテンシャルを新たに作成しなければならないという不便さがある。より

簡便な方法として、PAW 型擬ポテンシャル[9]の導入を計画中である。PAW が搭載されれば、XPS の解析が簡単になるだけでなく、現バージョンでは不可能な NMR の解析なども可能となる。PAW、および NMR 解析機能は 1 年後にリリース予定である。

2.1 に述べたように、エネルギー・ギャップをはじめとする 1 電子準位にまつわる問題の正統的改良は相当困難である。DFT 理論を越える多体問題に踏み込まなければならないからである。研究レベルでは GW 近似、GW 近似などが成功を収めているが、多大な計算時間を要するため、現時点ではこのような方法を Advance/PHASE に導入する計画はない。代替案として 2 つの方法を計画している。

一つは混合汎関数(hybrid functional)の導入である。混合汎関数では現在の DFT 汎関数にフォック項(交換相互作用項)を混ぜることによってエネルギー・ギャップを補正する。フォック項はエネルギー・ギャップを過大評価することが知られており、両者を混ぜ合わせることによってバンド・ギャップを再現できるはずである。対症的な対策であるが、GW 方などに比べれば、はるかに少ない計算時間で実行可能である。

もう一つは TDDFT[10] (Time dependent DFT) の導入である。TDDFT では印加された外場に対する波動関数の時間変化を追跡し、そのフーリエ変換からギャップを求めることができる。時間変動の項にギャップ上端の準位の情報が含まれているからである。この方法では、DFT では保証されていない 1 電子準位を直接用いないため、実測値に近い値が期待される。混合汎関数法と TDDFT のリリースは 1 年後の予定である。

より長期的には DFT+U 法における+U の計算機能を搭載する計画である。

参考文献

- [1] 当プロジェクトは以下の 3 つからなる
2002 ~ 2005 : 戦略的基盤ソフトウェアの開発、
2005 ~ 2007 : 戦略的革新シミュレーションソフトウェアの開発
2007 ~ 現在 : イノベーション基盤シミュレーション

ソフトウェアの研究開発

- [2] PHASE は以下の URL よりダウンロードすることができる。
<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/riss/dl/>
- [3] Advance/PHASE は以下の URL よりダウンロードすることができる。
<http://advancesoft.jp>
- [4] PHASE の入門書として、
山本武範、濱田智之、山崎隆浩、岡本政邦、大野隆央、宇田毅：第一原理シミュレータ入門、アドバンスソフト株式会社（2004）
- [5] Dye ,M.J.Wagner ,G.Overney ,R.H. Huang , T.F. Nagy , and D.Tomanek: "Cavities and Channels in Electrides" , J.Am.Chm. Soc.118 (1996) 7329.
- [6] E.Pehlke and M.Scheffler:"Evidence for site-sensitive screening of core holes at the Si and Ge (001)surface", Phys. Rev. Lett. 71 (1993) 2338.
- [7] E. Landemark, C. J. Karlsson, Y.-C. Chao, and R.I.G. Uhrberg: "Core-level spectroscopy of the clean Si(001) surface, Charge transfer within asymmetric dimers of the 2 x 1 and c(4 x 2) reconstruction", Phy. Rev. Lett. 69 (1992) 1588.
- [8] T.Aizawa , S , Suehara , S.Hishita and S. Otani: "Surface core-level shift and electronic structure on transition-metal diboride (0001) surfaces" , Phys.Rev.B 71 (2005) 165405
- [9] P. E.Blöchl: "Projector augmented-wave method" , Phys. Rev. B 50 (1994) 17953.
- [10] E. Runge and E. K. Gross: "Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems", Phys. Rev. Lett. 997 (1984).