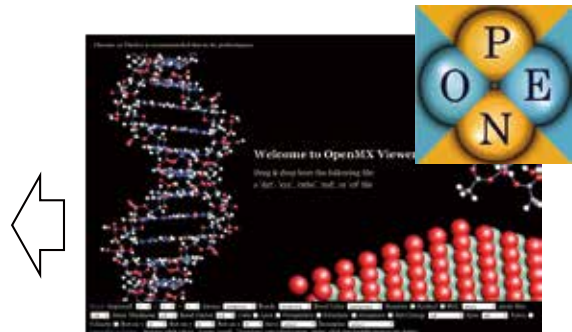
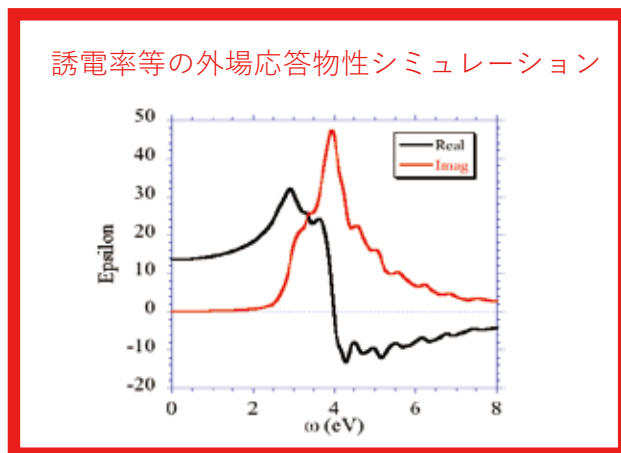


誘電率等の外場応答物性シミュレータ

シミュレータ概要

- ▶ 本シミュレータは、東京大学 尾崎泰助教授グループにより開発、公開(2003-)されている、第一原理計算プログラムパッケージ OpenMX (<http://www.openmx-square.org/>)に、電子寄与の複素誘電関数と光学伝導率を計算する機能拡張を行ったものです。有機、無機を含む広い物質群に適用可能です。多重並列化を実装し、1,000原子を超える系の複素誘電関数と光学伝導率が計算できます。



<http://www.openmx-square.org>

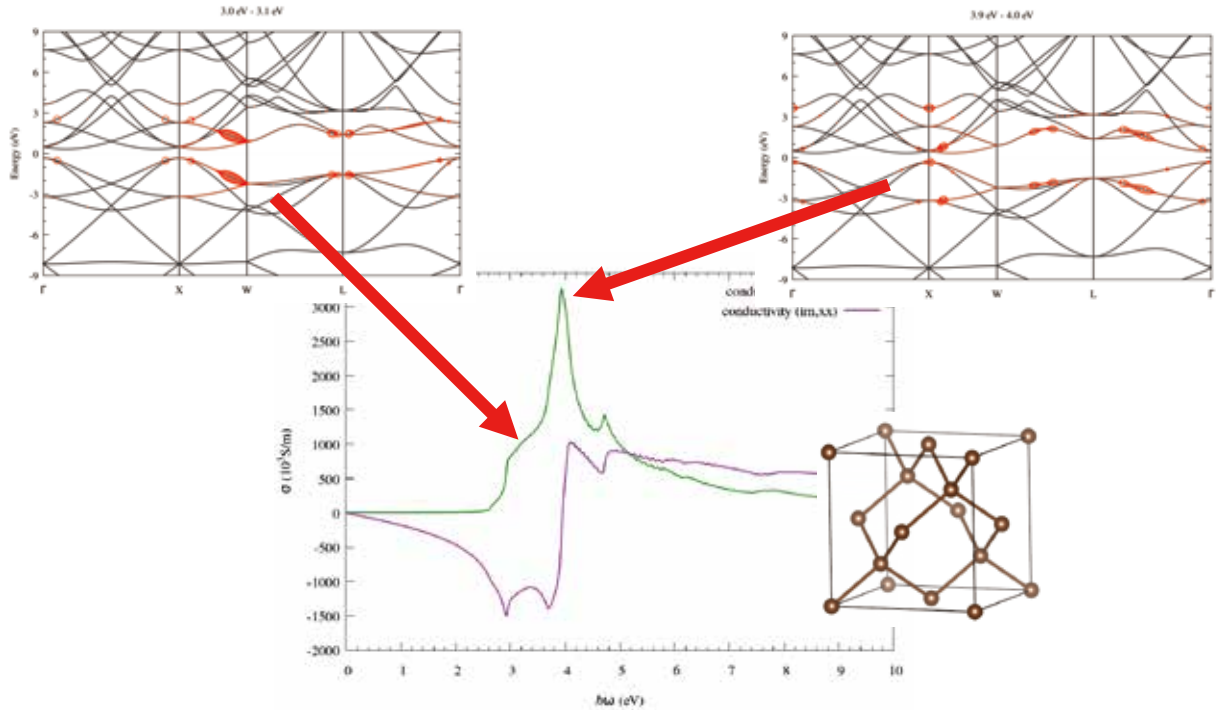
OpenMXコードによる複素誘電関数の量子シミュレーション

拡張機能

- ▶ 複素誘電関数と光学伝導率の計算機能
- ▶ 久保・グリーンウツの公式に基づいた第一原理計算
- ▶ OpenMXと一体化する形で、拡張機能として実装
- ▶ k点、バンド、固有値ソルバーに対する多重並列化

想定用途

- ▶ 有機、無機固体やナノ物質の複素誘電関数と光学伝導率
- ▶ 結晶やナノ物質の光吸収スペクトル



シリコン結晶の光学伝導率の計算結果と、ピーク構造の由来となる電子バンドの解析

動作環境

- ▶ ソースコード配布。OpenMXの一部として公開する。動作環境や使い方は、OpenMXに準じる。

ライセンス・配布方式

- ▶ 利用規約はGNU General Public License, version 2に従う
- ▶ OpenMXの公開サイト (<http://www.openmx-square.org/>) でPJ外に公開中

—謝辞—

本シミュレータの拡張部分は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託業務 (P16010) により開発されたものです。

【連絡先】超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

【シミュレータ配布問合せ窓口】u2m-sim-ml@aist.go.jp

2020.04