



データ取得API

ツール

クラスタシステム

クラウドシステム

利用案内

参考情報

ツール

- ▶ 第一原理電子構造自動計算システム
- ▶ nap (Nagoya Atomistic-simulation Package)
- ▶ 化合物予測アプリ
- ▶ 比熱容量予測アプリ
- ▶ APIツール

関連リンク

- ▶ MateriApps
- ▶ 朱鷺の杜Wiki - 機械学習

ホーム > ツール > 第一原理電子構造全自動計算システム



第一原理電子構造全自動計算システム

概要

- 材料のハイスループット計算スクリーニングのための第一原理電子構造全自動計算のツールです。
- 電子構造計算データベース (CompES-X)のデータ作成に使用しています。
- 実行環境にはPythonを使用しています。

フレームワーク

Template Oriented Atomic Simulation Toolkit (TOAST) は、ハイスループットの電子構造計算のためのPythonベースの自動フレームワークです。

TOASTは、3つの第1原理 (FP) 電子構造計算パッケージをサポートしています。

計算環境、ジョブマネージャ、計算パラメータ、およびワークフローの統一された設定は、いくつかのテンプレートファイルで事前定義されています。

TOASTは、CIFファイルをFP計算の入力ファイル、ジョブスクリプトの生成、ジョブの起動、データの解析と後処理に変換するためのカスタマイズされたPythonライブラリを実装しています。

必須環境

- Linux OS system
- Python 3.x or 2.x, numpy 1.x
- FP electronic structures calculations packages: VASP (5.3.5 and 5.4.1), Quantum Espresso (6.0) and ABINIT (8.0.8b)
- Gnuplot for band structure, density of states and Brillouin zone visualization
- Jmol, VESTA, or Xcrysden for structure, charge density, Brillouin zone and Fermi surface visualization
- Support PBS Pro/Torque, and GridEngine job scheduling systems

ダウンロード

for Python 3.x

- TOAST: Template Oriented Atomic Simulation Toolkit : [toast-0.6.0.tar.gz](#)
- [toast-0.6.0 利用マニュアル \(PDF\)](#)

for Python 2.x

- TOAST: Template Oriented Atomic Simulation Toolkit : [toast-0.5.4.tar.gz](#)
- [toast-0.5.4 利用マニュアル \(PDF\)](#)

ライセンス

本ソフトウェアはMITライセンスに従って公開しています。

