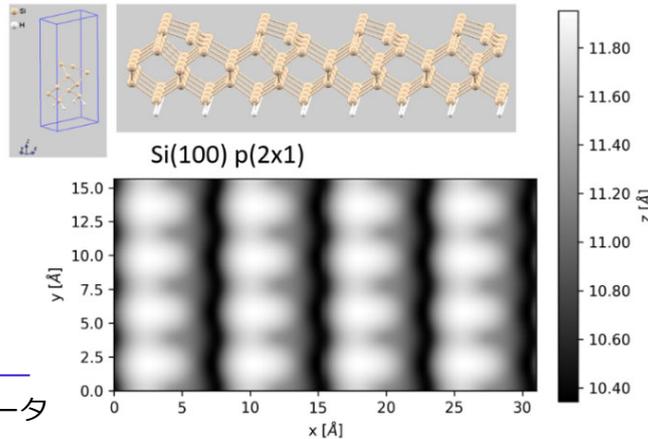


# 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

## ～材料の研究開発を強力に支援～

Advance/PHASE は、密度汎関数理論と擬ポテンシャルを用いた平面波展開による第一原理計算ソフトウェアです。

量子力学に基づき電子状態を求めるので、精度の高い計算結果を得ることができます。既存材料の分析だけでなく、新規材料の設計にもご活用いただけます。



定電流モードでのSTM像シミュレーション  
(高さ一定モードでも可能)

## Advance/PHASE の特徴

- ★豊富な第一原理計算機能
- ★充実したサンプルデータ
- ★便利なプロジェクト管理
- ★迅速な技術サポート
- ★自由にお使い頂ける GUI
- ★潤沢なマニュアル

## 進化し続ける Advance/PHASE

### ★MI 機能の強化

- ・データベース検索: 結晶構造、バンド図、EELS、弾性率、相図等
- ・データマイニング: 鉄鋼・磁性・二次元・誘電・圧電・熱電材料等のマイニング (ユーザ定義可)
- ・膜/基板のマッチング: 指定した膜材料の基板候補の探索  
指定した膜/基板材料で整合・不整合界面の作成
- ・バッチ・モデリング: 表面吸着・点欠陥・粒界・SQS の一括作成
- ・実験データとの比較: XRD・中性子回折パターン・TEM 像の計算
- ・結晶構造ツール: 構造類似性分析、新規結晶構造・結晶形の予測
- ・機械学習: 学習済みモデルを用いた第一原理計算結果の予測、モデルのトレーニング・指定した性質の予測

### ★GUI 機能の強化

- ・計算プロジェクトの一括自動生成
- ・分子性結晶における分子属性の自動判定
- ・バンド計算における k 点経路の自動生成
- ・吸着分子の振動モード解析の高速化対応
- ・計算終了の原因に合わせるジョブ状態表示
- ・ファイル名・列名・変数名のヒント追加
- ・一部原子の透明化・3D 表示機能の増強
- ・NEB 計算の始状態による終状態の生成
- ・高精細対応 (文字サイズ調整・配色改良)

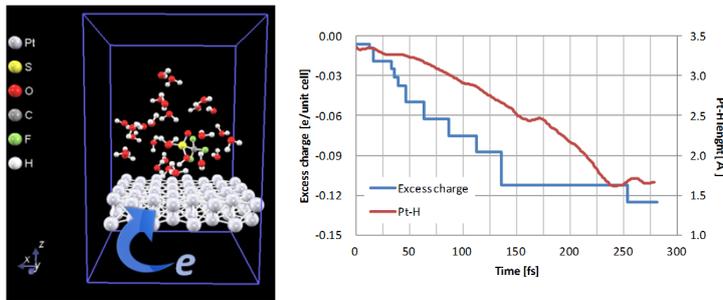
## 機能一覧

基本機能	全エネルギー計算、原子位置の最適化、計算ユニットセルの自動最適化
汎関数	局所密度近似、一般化勾配近似、hybrid 汎関数、DFT+U、van der Waals 補正、厳密交換汎関数 (EXX-OEP)
電子状態解析	電荷密度: 全電荷密度、部分電荷密度 状態密度: 全状態密度、原子分割局所状態密度、層分割局所状態密度、射影状態密度 各原子あたりの電荷量 (Bader 電荷解析など)、Born 有効電荷
磁性解析	電子スピン分極解析、スピン-軌道相互作用による磁気異方性
光学特性	誘電関数(電子系および格子系)、非線形感受率、X線光電子分光、EELS(電子エネルギー損失分光)/XAFS(X線吸収微細構造)
格子振動解析	振動モード、フォノン状態密度、フォノンバンド、熱力学解析 (比熱・自由エネルギーなど)
分子動力学	NVE および NVT
反応経路探索	Nudged Elastic Band 法、メタ・ダイナミクス法、拘束条件付きダイナミクス
雰囲気制御	Effective Screening Medium 法、Constant- $\mu$ 法、3D-RISM-SCF 法
Post SCF 解析	ストレス・テンソル、仕事関数、圧電定数、STM・AFM 像
解析支援	付属 GUI による入力ファイル作成および計算結果の可視化、MI 機能
関連プログラム連携	BoltzTraP(Fortran 版)・BoltzTraP2(Python/C++版)連携、Wannier90 連携

# 解析事例

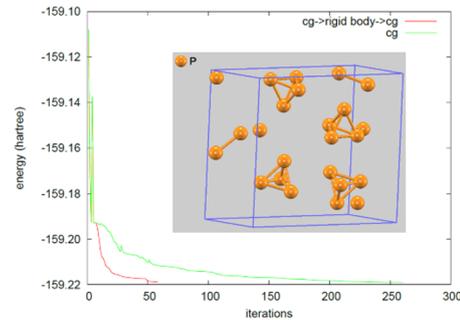
## ESM 法による白金表面での酸性水溶液の反応

Effective Screening Medium(ESM)法により白金表面に電場を印加した状態で、トリフルオロメタンスルホン酸水溶液の第一原理 MD 計算を行っています。白金表面上の電荷 (Excess charge)と白金-水素距離の経時変化を右図に示します。電場存在下で、プロトンが白金に移動することがシミュレーションできています。



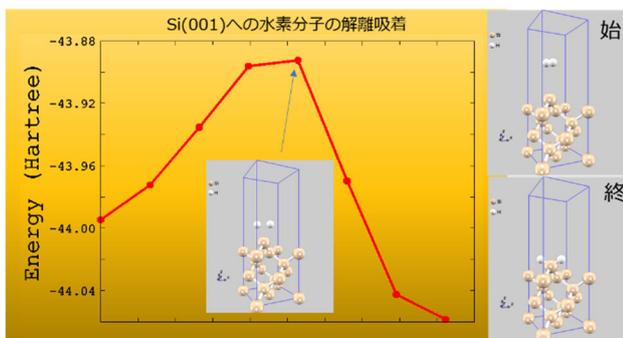
## 剛体のシミュレーションに基づいた分子性結晶の計算

指定された原子の組を剛体とみなし、そのトルクと重心に働く力を利用して緩和計算/分子動力学シミュレーションを行います。これで通常の緩和計算の場合時間のかかる、分子性結晶や表面への分子の吸着計算などを高速に行うことが可能となります。図は、途中で剛体(rigid body)ダイナミクスを利用した場合、収束性を大幅に改善したことを示しています。



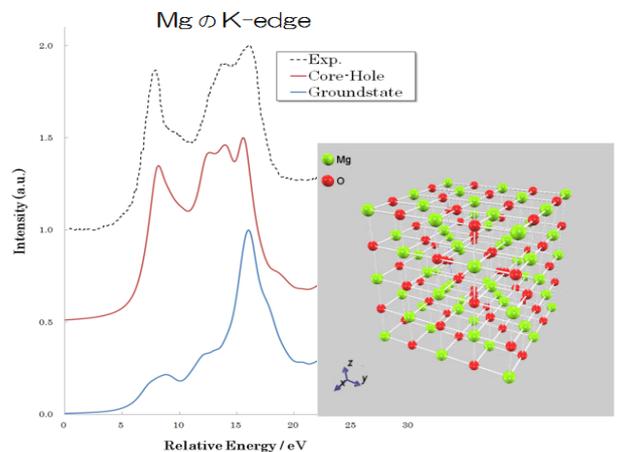
## NEB 法による反応経路探索

Nudged Elastic Band (NEB) 法を用いて、始状態と終状態の原子配置が既知であるとして、始状態と終状態の間の中状態の原子配置やエネルギーなどを隣接する状態間がばねによって結ばれているという拘束条件の下で構造最適化計算を行います。これで反応障壁や反応経路が求められます。



## EELS : MgO の Mg K-edge スペクトル

内殻正孔を考慮した擬ポテンシャルを用いて、特定の原子の内殻軌道から電子を励起するスペクトルが計算できます。図は、MgO 中の Mg 原子の 1s 軌道からの励起である K-edge 吸収端の計算例です。



# 動作環境

Windows 版	単一の計算機でご利用ください。 64bit OS 8.1、10
Linux 版	PC クラスタを利用した並列計算をご利用いただけます。(ノード間接続はギガビットイーサネット) Red Hat Enterprise Linux 6 以上 (AMD64, Intel 64 のみ)、またはその互換ディストリビューション。
Mac 版	GUI のみ (10.12 以降)

Advance/PHASE は、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が実施した文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトおよび「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」プロジェクトの成果 (ソフトウェア) をアドバンスソフトが商品化したものです。アドバンスソフトはこれらのプロジェクトに参加しソフトウェアの開発を担当しましたが、その成果を独自に改良して商用パッケージソフトウェアとし、販売保守を行っております。



アドバンスソフト株式会社

詳しい情報をご希望の方は、まずはお問い合わせください。デモンストレーションも可能です。

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目 3 番地 新お茶の水ビルディング 17 階西

TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580 URL: <http://www.advancesoft.jp/>

E-mail: [office@advancesoft.jp](mailto:office@advancesoft.jp)