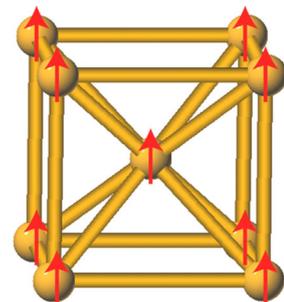


オンラインセミナー 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE 製品紹介セミナー

2023年1月27日(金) 開催

プログラム

1. アドバンスソフト株式会社のご紹介 主催者あいさつ 1
2. 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE の概要・特徴機能 5
第1事業部 技術第1部 岡崎 一行
3. 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE ver. 4.3 新機能について 37
第1事業部 技術第1部 胡 春平
4. **招待講演** ※資料は一部非公開です
**「酸化チタンへの不純物ドーピングが次世代蓄電池
負極特性に与える効果とその解析事例について」** 71
鳥取大学 工学部 化学バイオ系学科 准教授 薄井 洋行 様
5. 関連サービスのご紹介 87

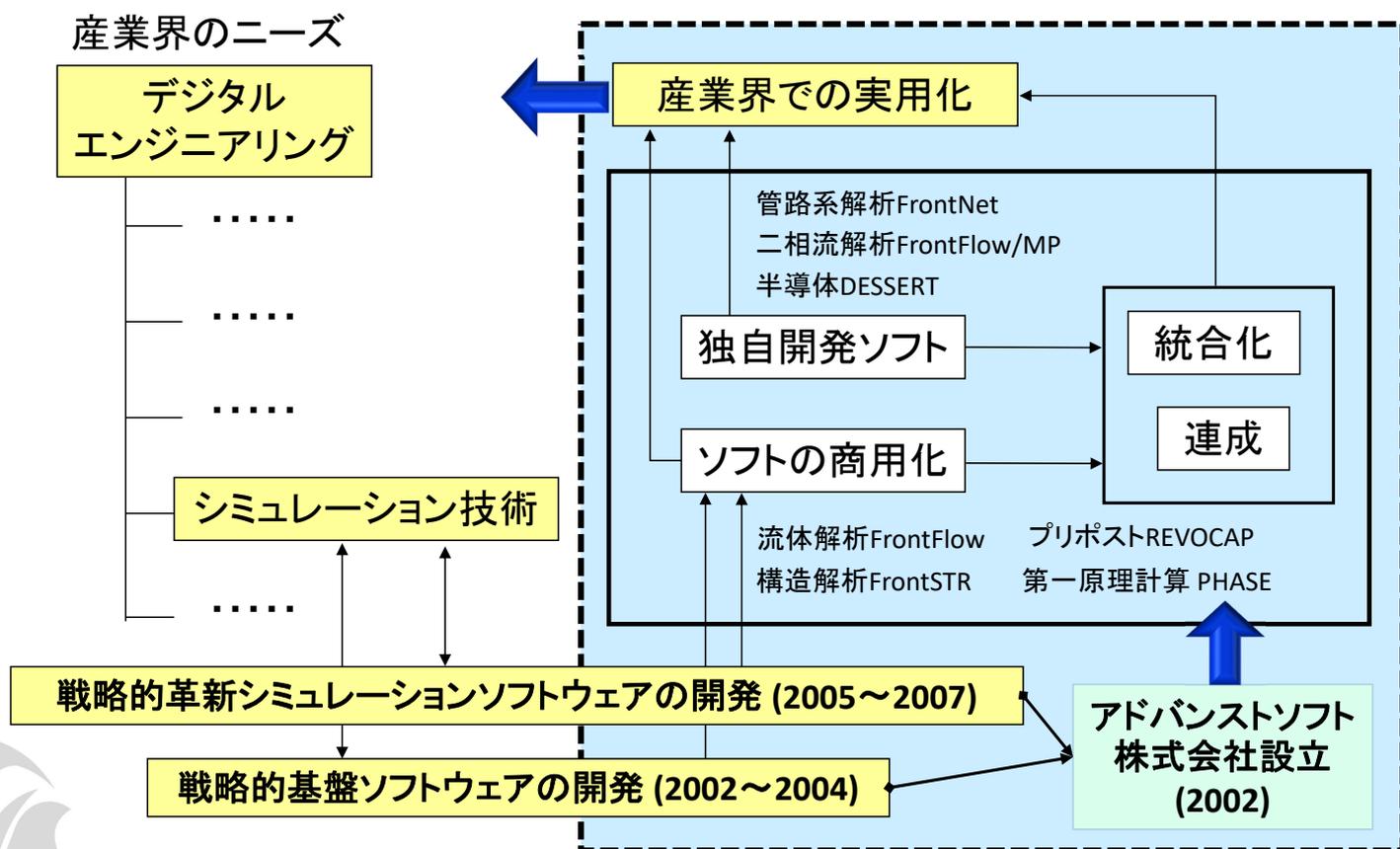


アドバンスソフト株式会社のご紹介

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE 製品紹介セミナー

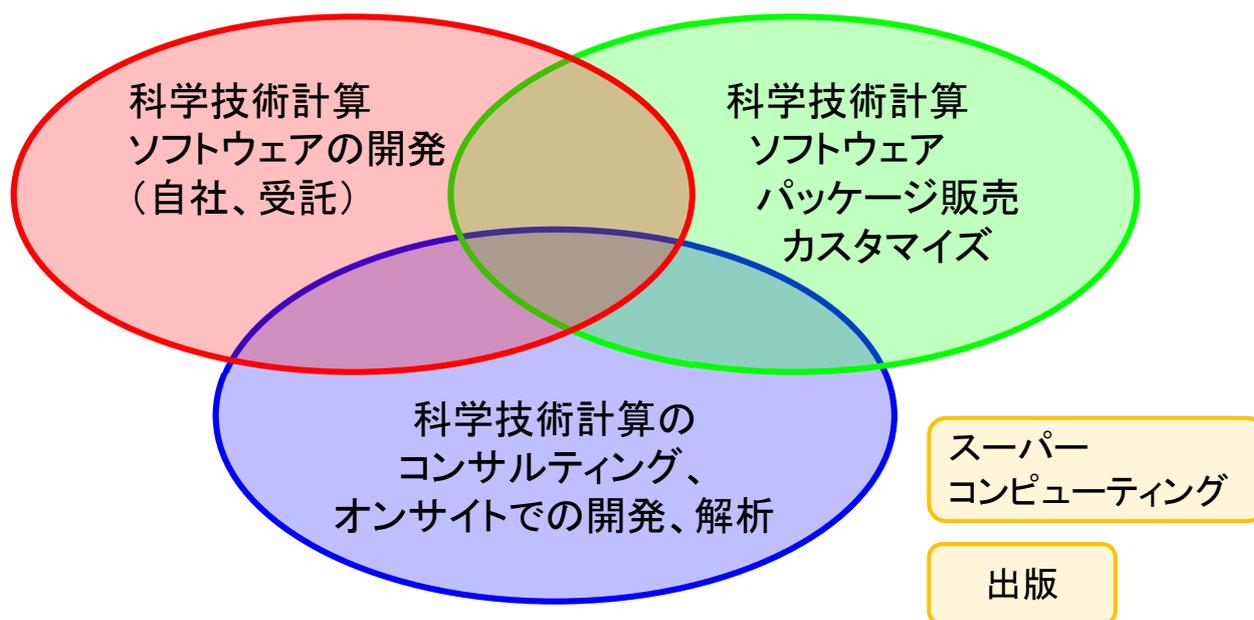
2023年1月27日（金）開催
アドバンスソフト株式会社

アドバンスソフトとは



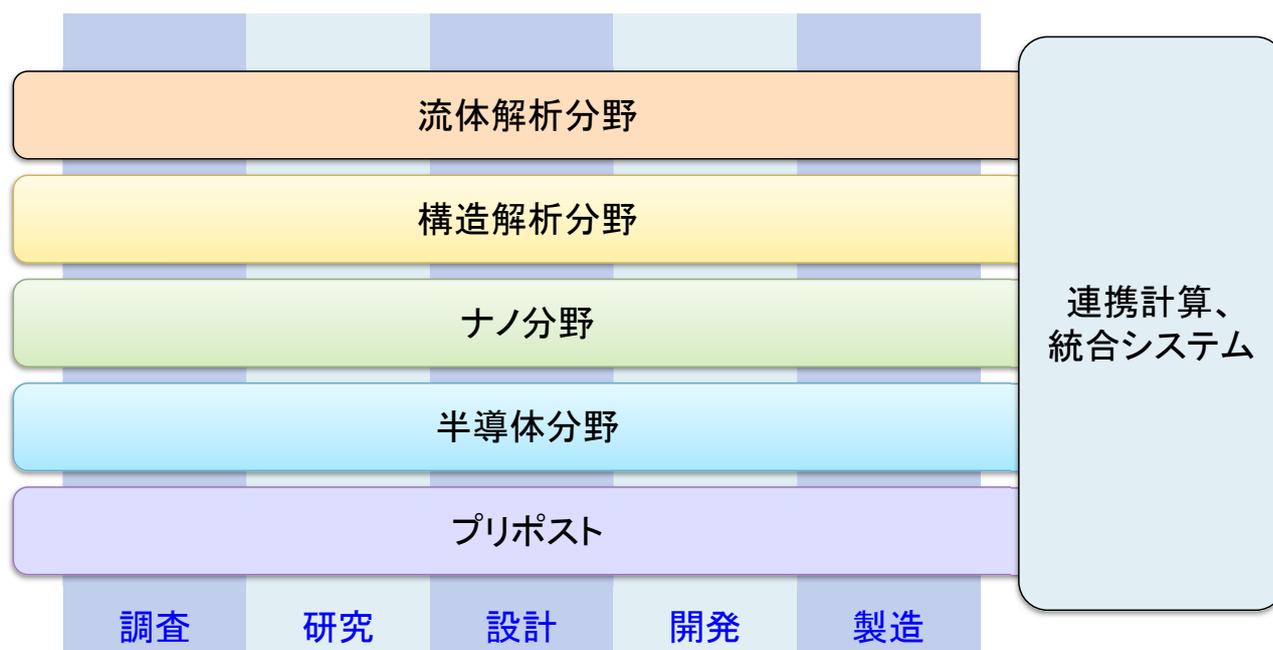
事業内容

アドバンスソフトがご提供するサービス



科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした、
科学技術計算に関する様々なソリューションをご提供します。

事業分野



産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、
科学技術計算によるソリューションをご提供します。

ソフトウェアご紹介

<p>第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE</p> <p>密度汎関数理論に基づき、物質の性質を原子・分子レベルから解析する第一原理計算ソフトウェアです。</p>	<p>ナノ材料 GUI 付属</p> <p>ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo</p> <p>ナノ材料 プリポスト</p> <p>材料解析ソフトウェア QuantumESPRESSO と LAMMPS に対応した総合 GUI です。</p>	<p>流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red</p> <p>流体</p> <p>非圧縮性から圧縮性流れまで、広範囲で複雑な流れに対応した汎用 3 次元流体解析ソフトウェアです。</p>	<p>圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i</p> <p>流体</p> <p>非構造格子に対応した圧縮性流体解析ソルバーです。特に遷音速や超音速の流れに適しており、高い並列化効率で計算出来ます。</p>
<p>大規模 3 次元 TCAD システム Advance/TCAD</p> <p>超微細半導体デバイスからパワーデバイスまで、高度な機能と使いやすい GUI を備えた 3 次元 TCAD システムです。</p>	<p>半導体デバイス GUI 付属</p> <p>ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD</p> <p>ナノ材料 AI・機械学習</p> <p>Neural Network Potential に基づいた分子動力学のソフトウェアです。第一原理計算の結果を教師データとして分子力場を作成します。</p>	<p>気液二相流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP</p> <p>流体</p> <p>沸騰と凝縮を伴う気液二相流の流動特性や伝熱特性を 3 次元で解析するソフトウェアです。</p>	<p>管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet</p> <p>流体 GUI 付属</p> <p>配管や流体機器から成る管路系内流体に対する 1 次元過渡解析の実用的なソフトウェアです。</p>
<p>大規模電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave</p> <p>光波・電磁波</p> <p>マクスウェル方程式を FDTD 法で 3 次元的に解く電磁波解析ソフトウェアです。アンテナの電波解析から光の干渉や回折を考慮した光波解析まで幅広く適用できます。</p>	<p>構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR</p> <p>構造</p> <p>固体の変形や熱伝導を、有限要素法を用いた 3 次元で解析するソフトウェアです。</p>	<p>大気拡散影響予測システム Advance/Emerg</p> <p>流体 GUI 付属</p> <p>大気拡散物質の挙動予測と影響評価のためのソフトウェアシステムです。</p>	<p>深層学習用ツール Advance/iMacLe</p> <p>AI・機械学習</p> <p>機械学習のうち、ニューラルネットワークによる深層学習に特化、最小限度の機能に絞込んだ比較的軽いツールです。</p>
<p>汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP</p> <p>プリポスト</p> <p>解析の一連の流れをスムーズに行う事を実現した汎用プリポストプロセッサです。</p>	<p>音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise</p> <p>音響</p> <p>環境騒音、機器内の共振等における音場を有限要素法を用いた 3 次元で解析するソフトウェアです。</p>	<p>自社による開発 (国プロ含む) 開発チームによる質の高いサポートサービス カスタマイズや機能追加も応相談 並列数無制限 (追加料金なし)</p>	

ソフトウェアの解析事例

解析事例Webページをご覧ください。

アドバンスソフト 事例集

検索

<http://case.advancesoft.jp>

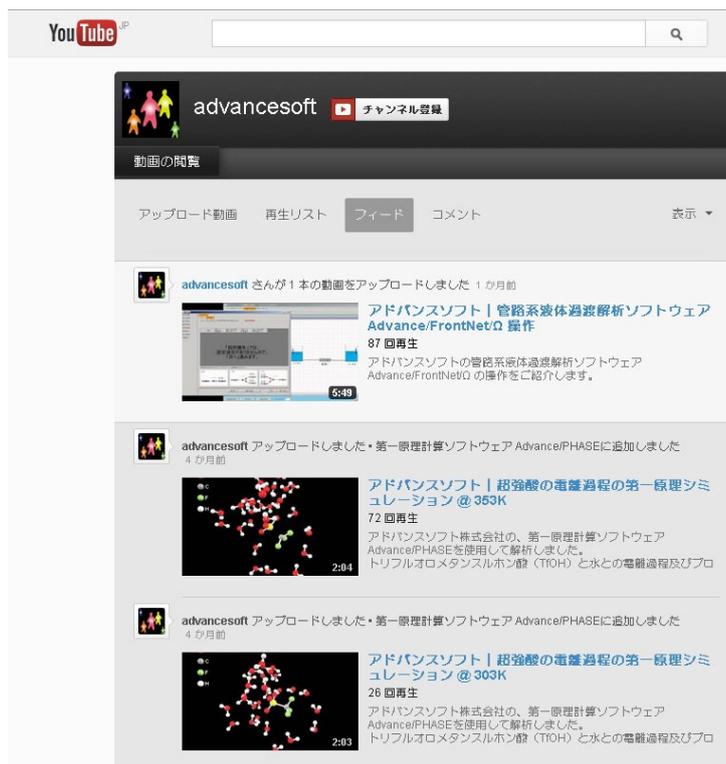
- ソフトウェア名からだけでなく、産業分野別、解析分野別の検索が可能となりました。
- 最新の事例を掲載しました。今後も逐次最新事例を紹介いたします。

産業分野別	解析分野別
自動車・運輸	流体
材料・化学	爆発・燃焼
産業機械	構造
航空宇宙	振動音響
エレクトロニクス	ナノ・バイオ
建設土木	プリポスト
原子力	半導体デバイス
エネルギー	光・電磁波
環境・防災	

facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中

<http://www.facebook.com/advancesoft.jp>

<http://www.youtube.com/user/advancesoft>



第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASEの概要・特徴機能

第1事業部 技術第1部 岡崎 一行

「オンラインセミナー」Advance/PHASE 製品紹介セミナー
2023年1月27日（金）
アドバンスソフト株式会社

内容

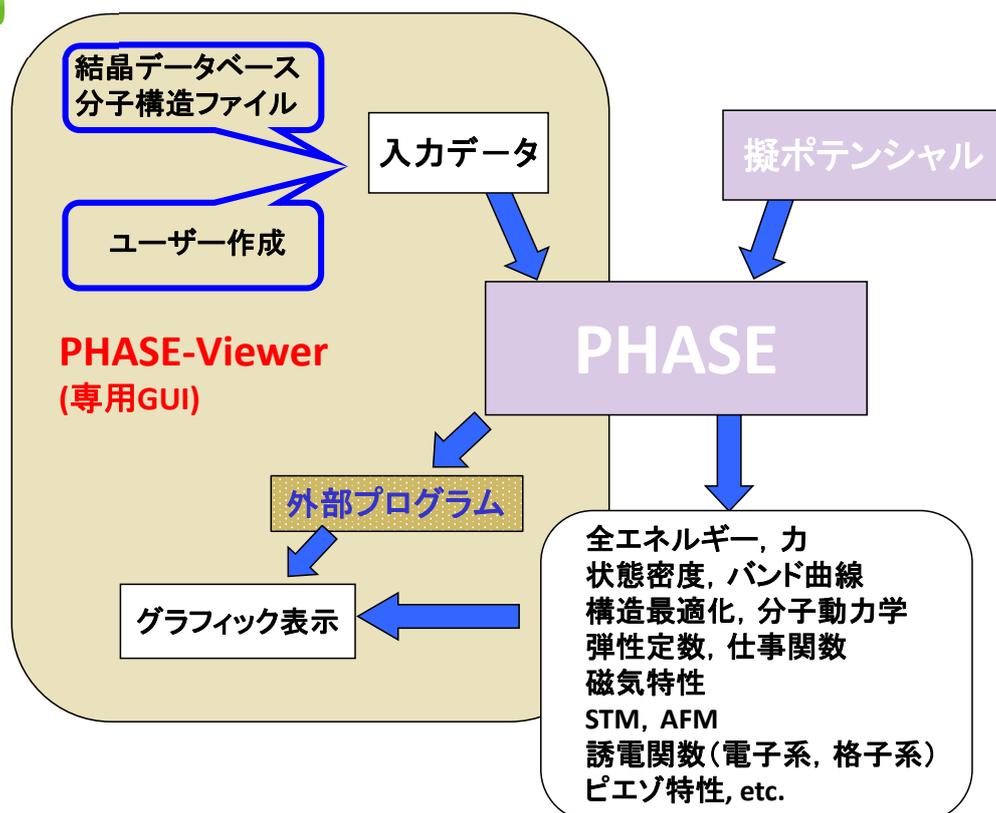
1. Advance/PHASEとは
2. 理論基礎
3. 基本機能
4. 特徴機能
5. 専用GUIとMI機能

Advance/PHASEとは

- 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。

AdvanceSoft

Advance/PHASEの構成



Advance/PHASEとは

実験結果などの**経験的なパラメータ**を用いずに、物質の性質を**原子レベル**で精密に解析するための第一原理計算ソフトウェア

- 密度汎関数理論
- 平面波展開(周期境界条件)
- (第一原理)擬ポテンシャル

密度汎関数理論とは

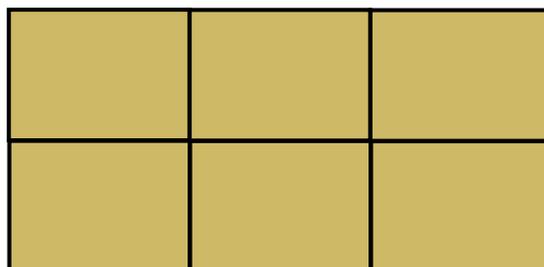
- 基底状態に関する量は全て、電子(電荷)密度の一意的でユニバーサルな**汎関数**(すなわち関数の関数)である。

交換・相関ポテンシャル(近似がある部分)

- Local Density Approximation (LDA)
- Generalized Gradient Approximation (GGA)
- ハイブリッド汎関数(HSE06など)
バンドギャップを高精度に計算したい場合(コスト大)
- Van der waals補正(DFT-Dなど)
層状物質、金属表面への有機分子の吸着、分子性結晶の構造、生体分子の安定構造の場合

平面波展開

- 波動関数を平面波の和で記述する(フーリエ変換と Blochの定理)。
- 周期系の取り扱いに適している。



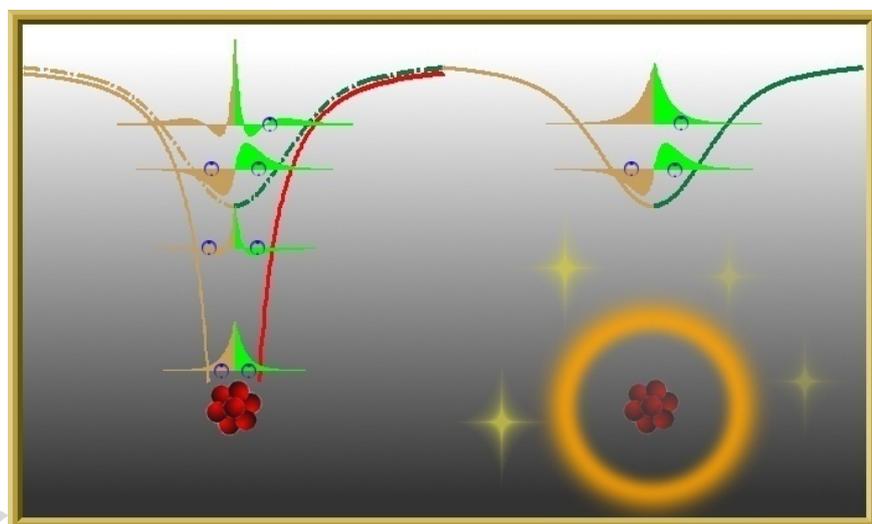
真空層を設けることにより、表面・界面などの二次元系、分子のような孤立系を取り扱うことも可能

擬ポテンシャルとは

内殻電子は、物質の性質に(ほとんど)影響を与えない。



ポテンシャルとして取り扱う



計算効率が高い

第一原理
擬ポテンシャル

相対論効果を
考慮

Advance/PHASE付属擬ポテンシャル

元素周期表

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Ac-Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
			La-Lu	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
			Ac-Lr	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

■ checked by PHASE & CIAO

■ checked by CIAO

擬ポテンシャルの種類:

- Norm-Conserving (nc)
- UltraSoft pseudopotential (us)
- Projector Augmented Wave (paw)

Advance/PHASEの計算機能

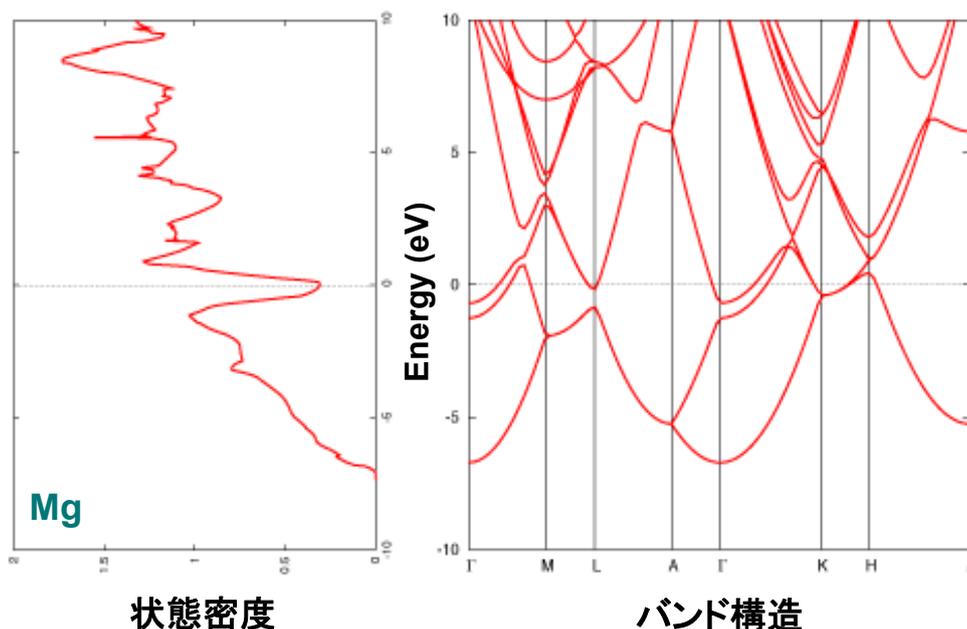
機能一覧

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- μ 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

ソルバーの基本機能紹介(1)

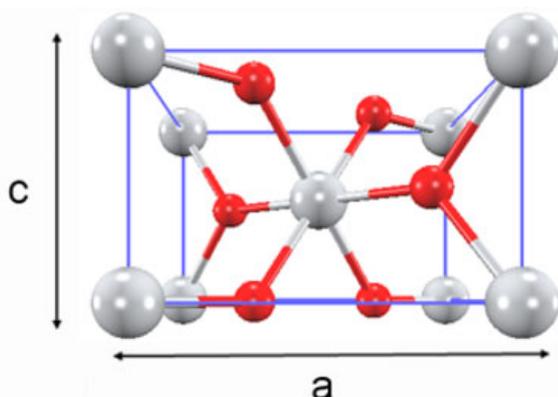
- 状態密度・バンド構造
- 結晶系：
金属・半導体・絶縁体
磁性体・反強磁性体
遷移金属酸化物（強相関電子系）
ハーフメタル

Mgの状態密度とバンド構造

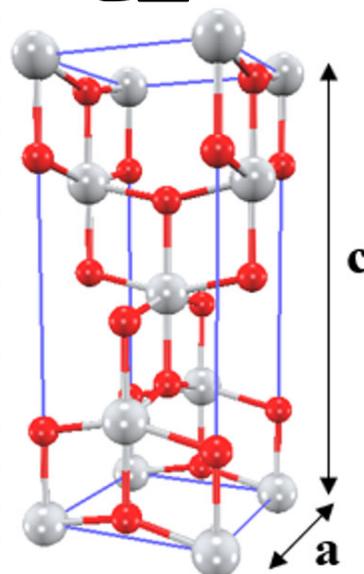


TiO₂の結晶構造

ルチール型



アナターゼ型

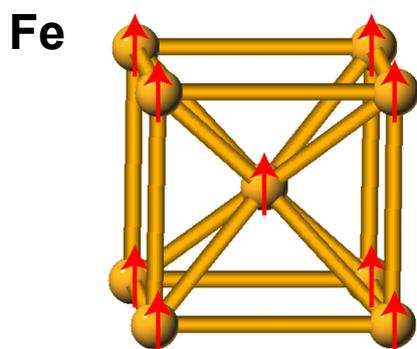


	PHASE	実験値
a (Å)	4.562 (-0.7%)	4.593
c/a	0.640 (-0.6%)	0.644

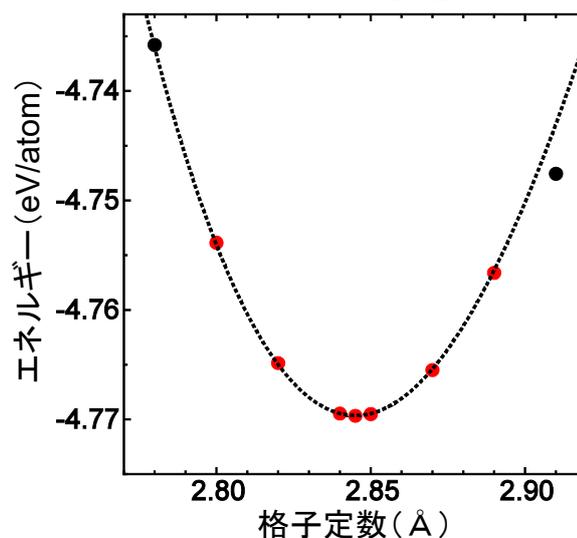
	PHASE	実験値
a (Å)	3.756 (-0.7%)	3.784
c/a	2.510 (-0.2%)	2.515

磁性体の計算例—Fe (強磁性) の結晶構造—

結晶構造 (体心立方)

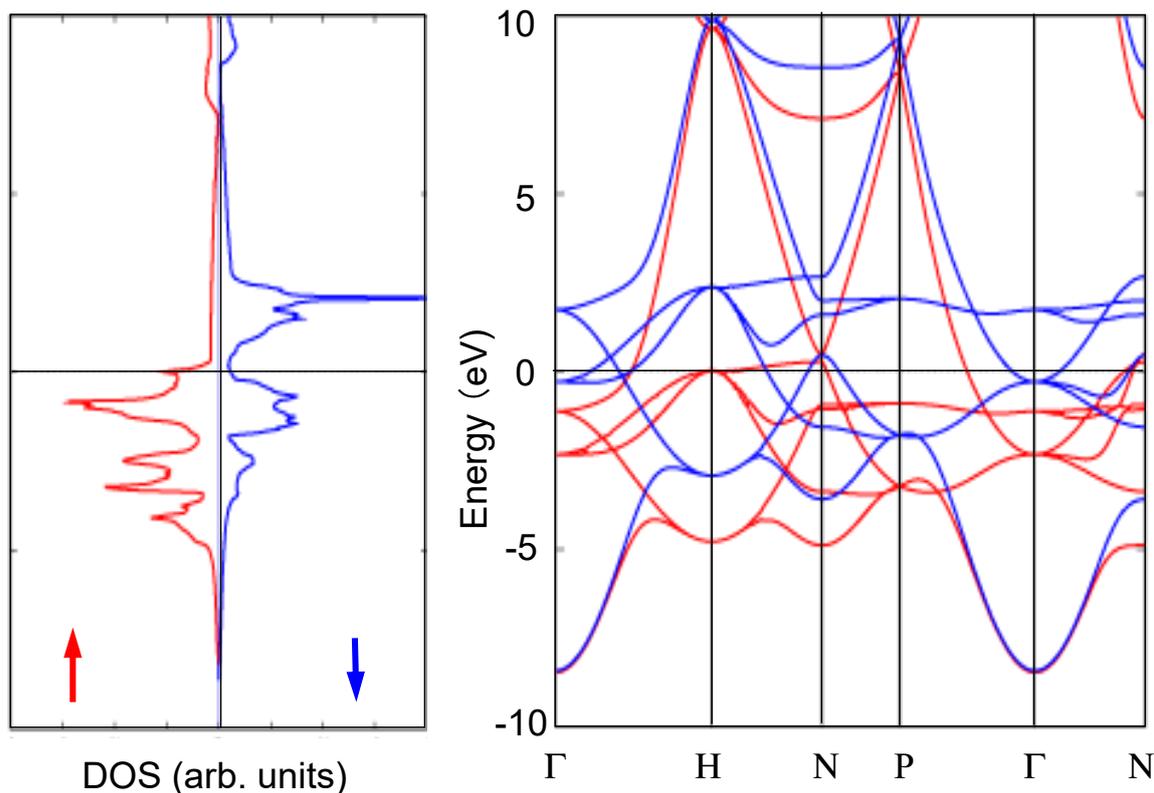


凝集エネルギーの格子定数依存性



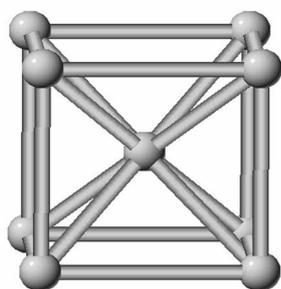
	PHASE	実験値
a (Å)	2.845 (-0.8%)	2.87
E(eV/atom)	4.77 (11.4%)	4.28
B (GPa)	178.4 (6.0%)	168.3

Fe の状態密度とバンド構造

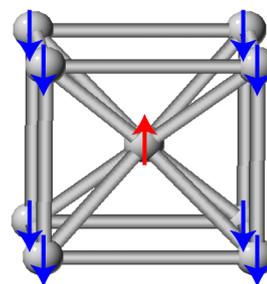


Cr (クロム) の磁性による全エネルギー

結晶構造 (体心立方)



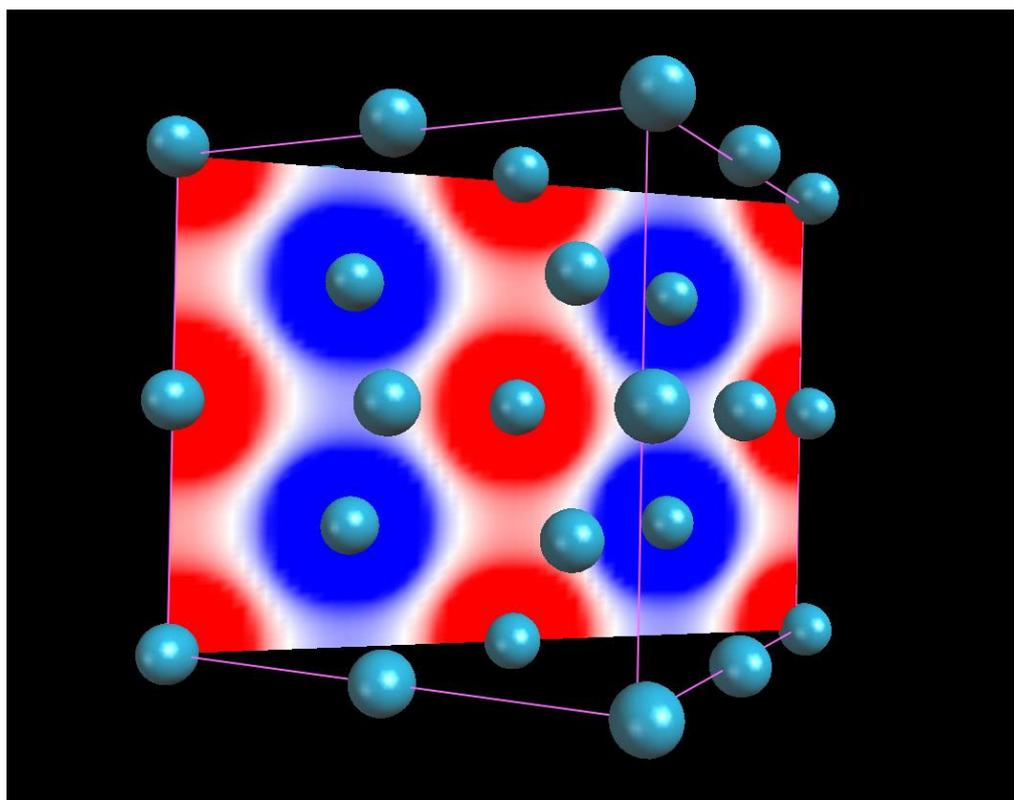
(a) 常磁性



(b) 反強磁性

	常磁性	反強磁性	実験値
格子定数 (Å)	2.86 (-0.7%)	2.99 (4.0%)	2.88
エネルギー (eV/atom)	2.92 (-28.7%)	3.78 (-7.8%)	4.10

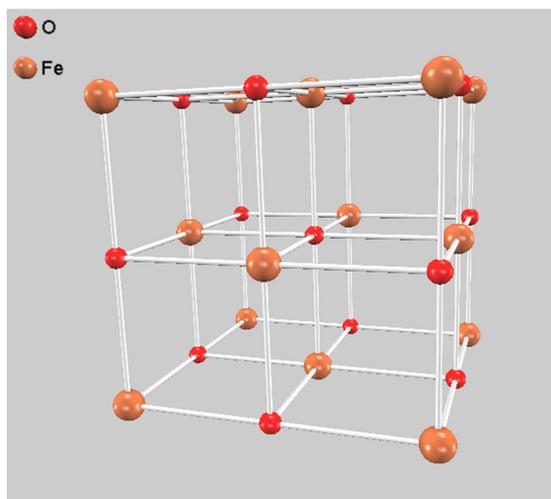
Cr (反強磁性) のスピン分極密度



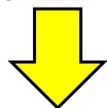
$n_{\uparrow}(\mathbf{r}) - n_{\downarrow}(\mathbf{r})$ の符号を青, 赤で表示

DFT+U: 強相関電子系の電子状態

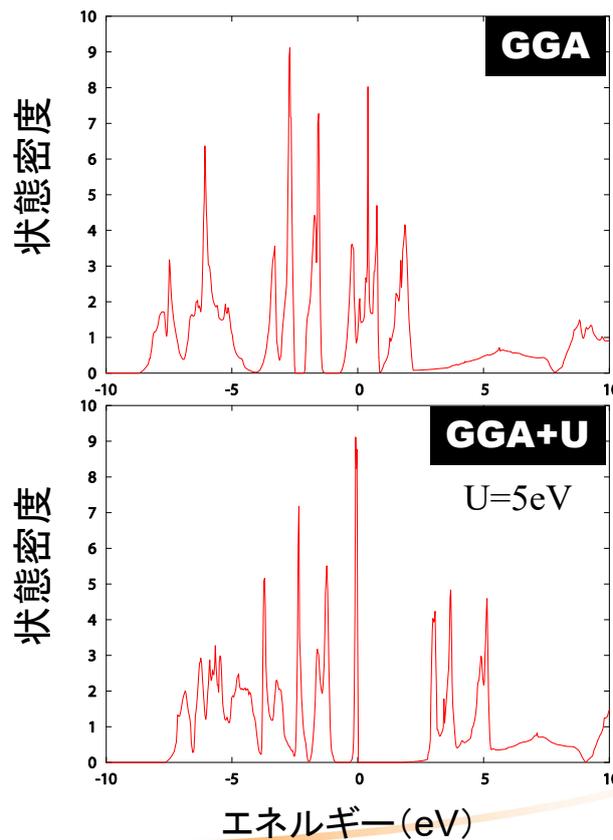
FeO



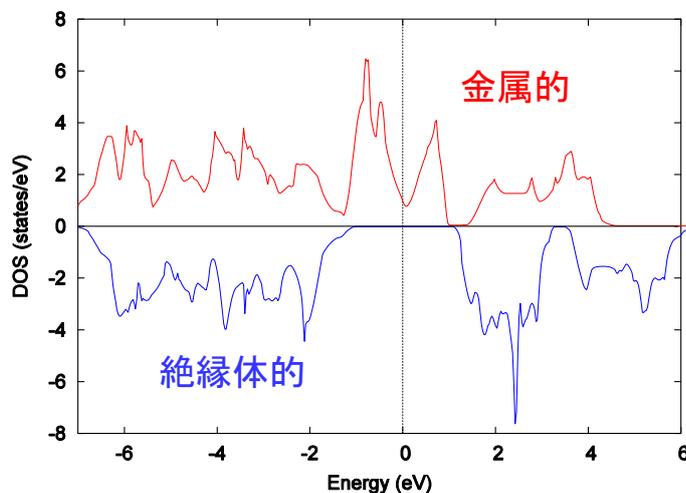
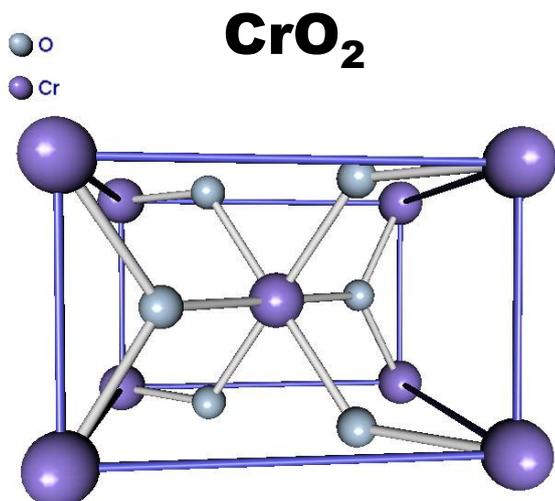
局在軌道間(Feの3d)のクーロン相互作用を補正



エネルギーギャップが開く



ハーフメタル

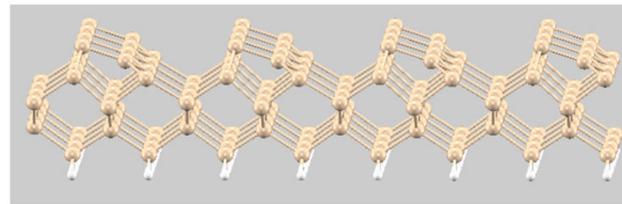
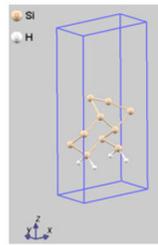
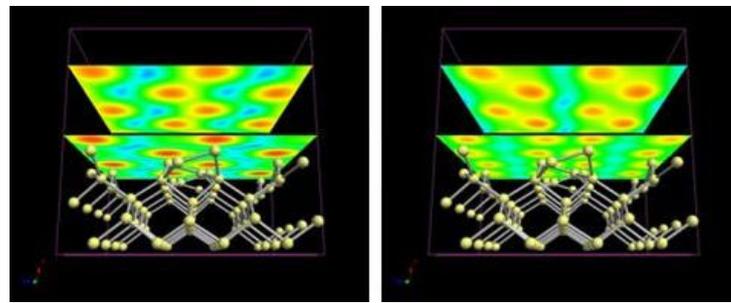


状態密度

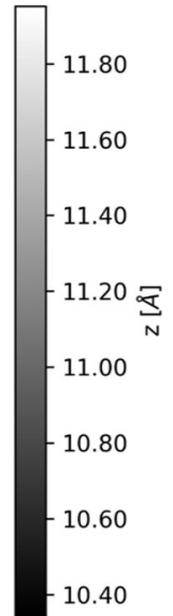
ソルバーの基本機能紹介(2) 電子状態解析機能

- 部分電荷密度
- 等エネルギー面
- 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 (DFT+U)
- (最大局在)ワニエ関数

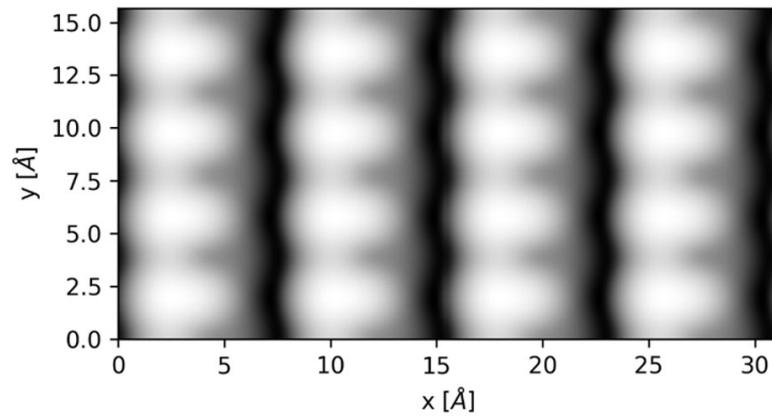
Si(100) p(2×2)表面
のSTM像のシミュレ
ーション結果
(高さ一定モード)



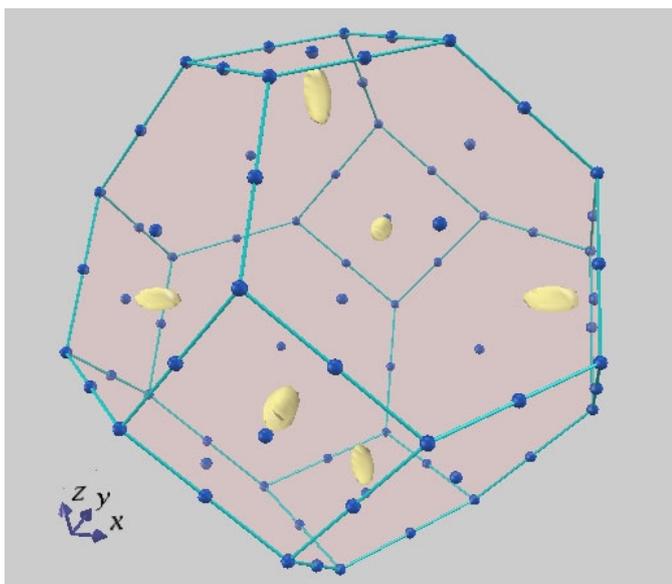
Si(100) p(2x1)



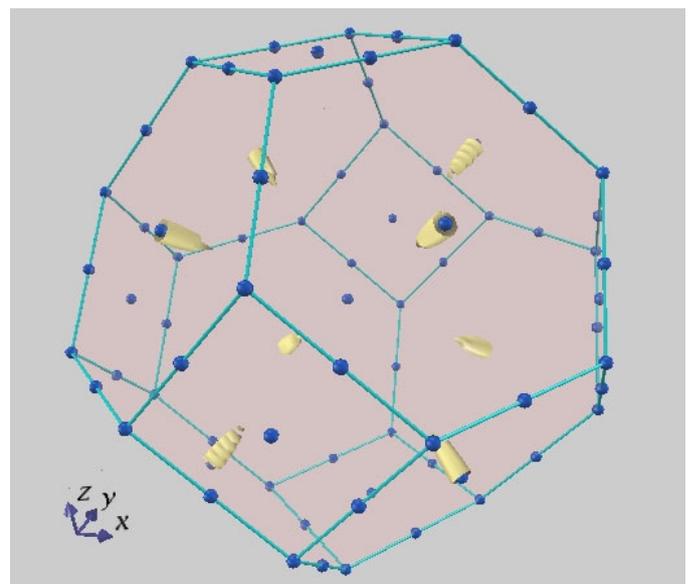
電流一定モードのSTM像
のシミュレーション結果
(部分電荷密度の解析)



等エネルギー面

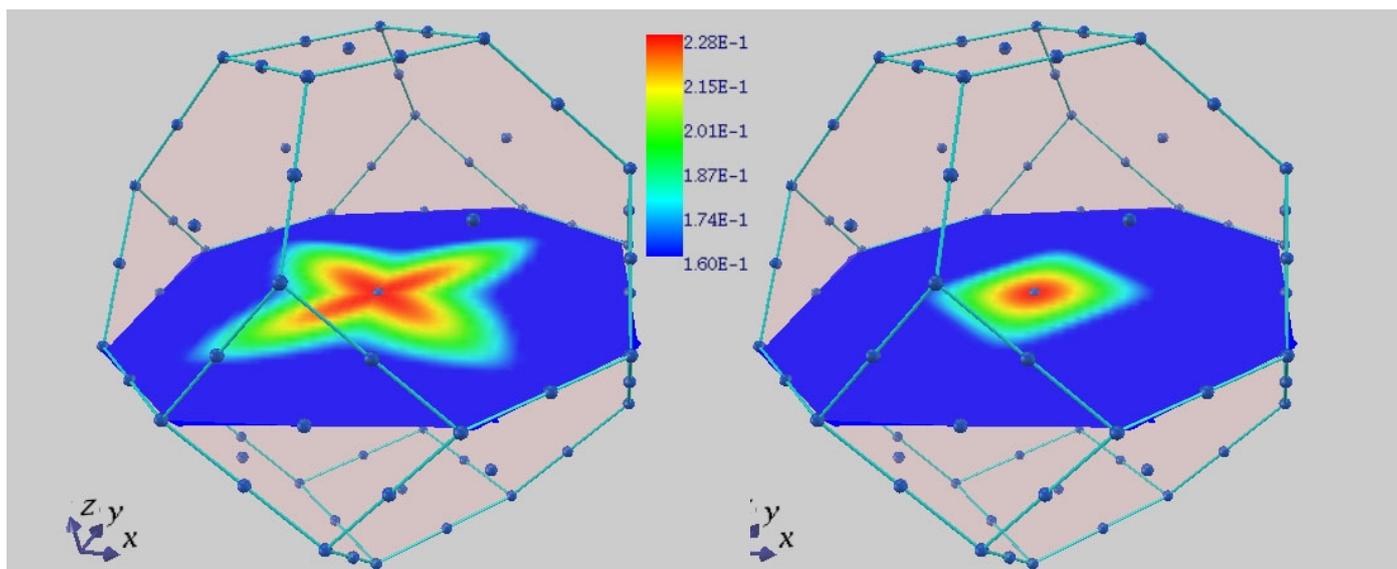


Si伝導帯の底



Ge伝導帯の底

エネルギー等高線

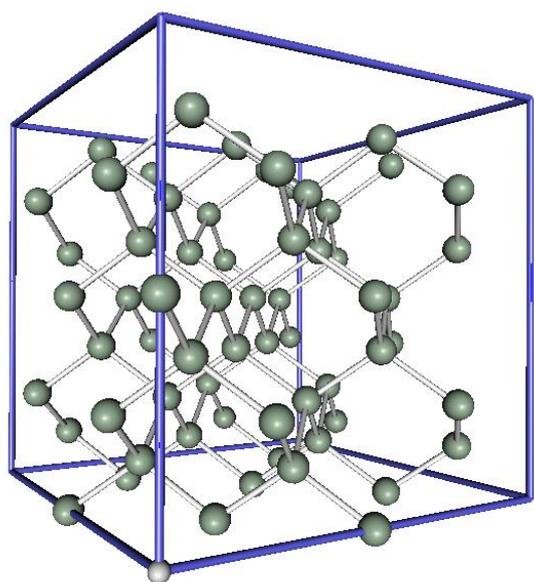


重い正孔

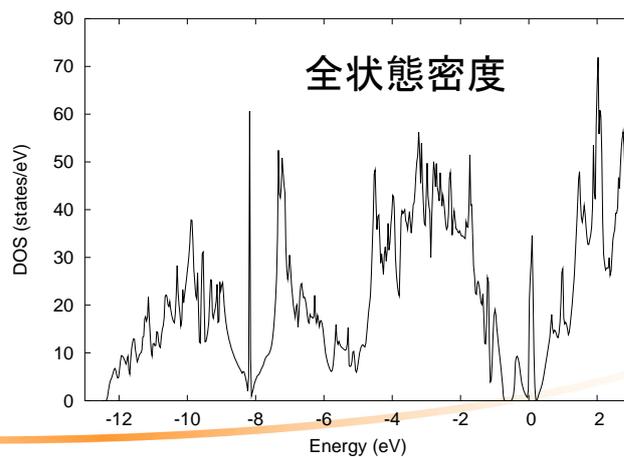
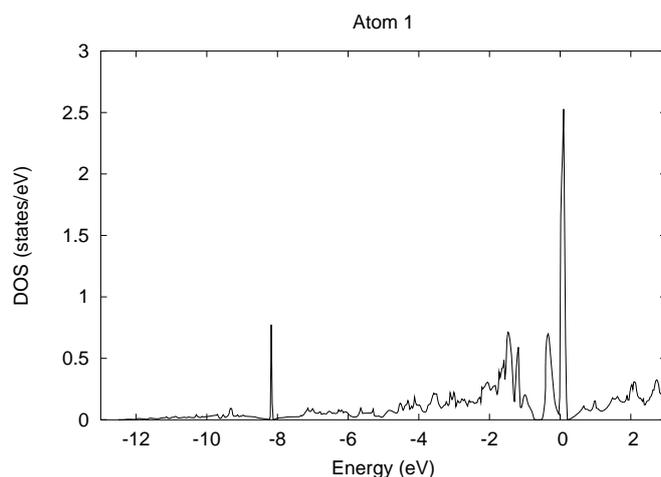
軽い正孔

Siの価電子帯

原子分割局所状態密度： Si結晶中の空孔

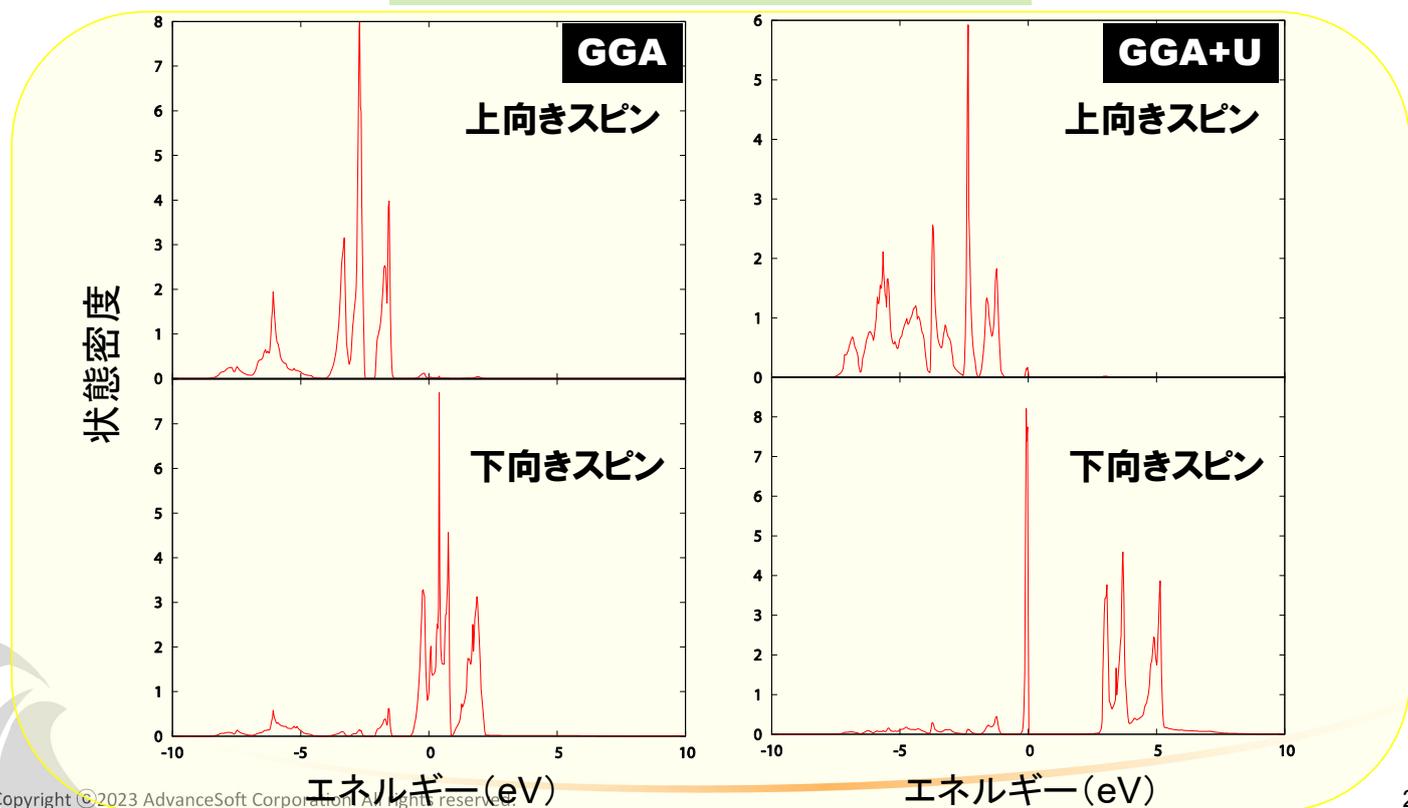


Si 63原子 + 空孔



電子状態解析: 射影状態密度

Feの3d電子の状態密度



ソルバーの基本機能紹介(3)

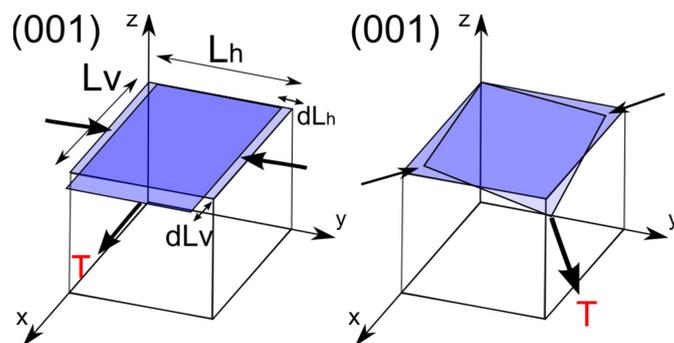
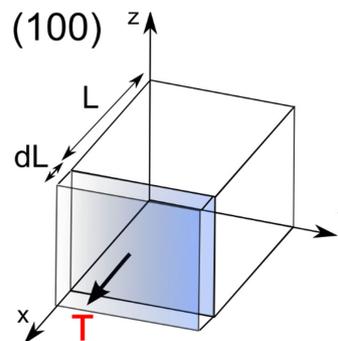
様々な解析機能

- ストレステンソル (弾性率の計算)
- 誘電率 (電子系、格子系)
- 圧電定数
- フォノン (Γ 点のみ、分散)
- 解離・吸着 (触媒反応など)
- 反応経路探索 (NEB)

ストレステンソルの利用 I

Si単結晶の弾性定数

	PHASE	実験値*
ヤング率E [GPa]		
E<100>	123.6	130.8
E<110>	157.2	169.7
E<111>	172.9	188.4
ポアソン比ν		
ν (001)面内 <100><010>	0.262	0.280
ν (001) 面内 <110><110>	0.061	0.066



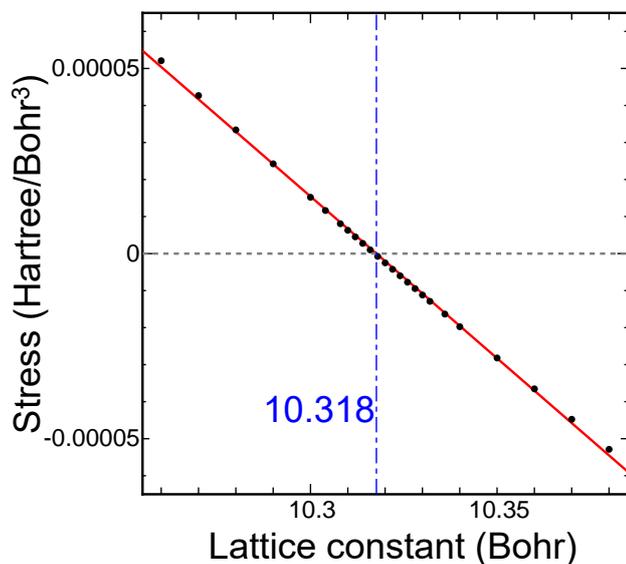
*) H. J. McSkimin, et al.,
Phys. Rev. **83**, p.1080(L) (1951).

材料異方性を取り扱うことができます。

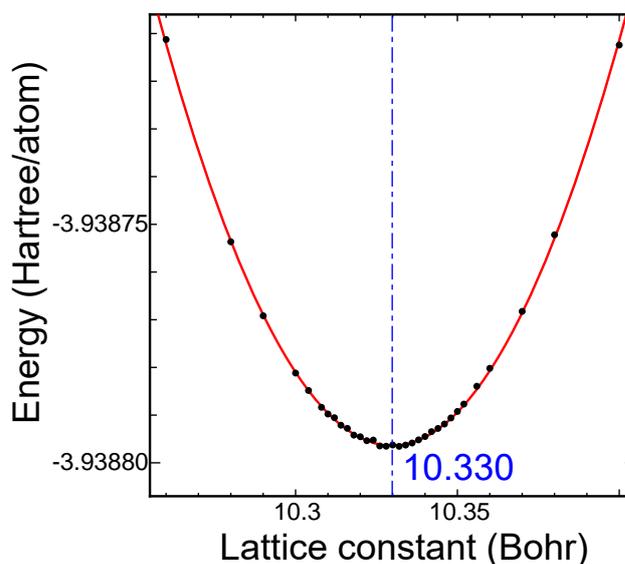
ストレス・テンソルの利用 II

格子定数の決定

ストレスから求める



エネルギーから求める

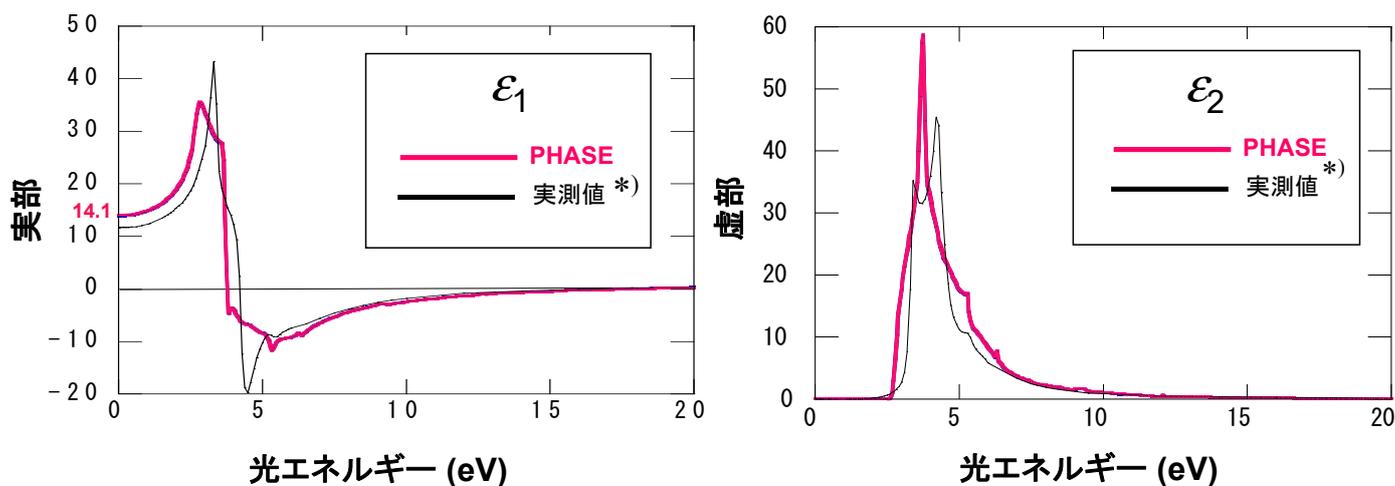


- 最安定構造でストレスは0
- 最低2点の計算が良い

- 最安定構造でのエネルギーは極小
- 最低でも3点での計算が必要

現バージョンでは、格子定数は自動的に決められる。

Siの誘電関数(電子系)

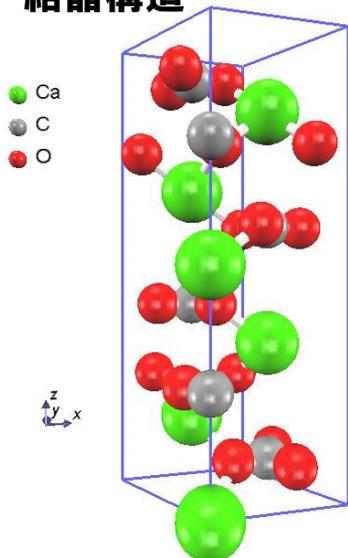


*) CRC Handbook of Chemistry 79-th Ed. CRC Press, New York 1998

$$\text{Im}[\epsilon^{ele}(\omega)] = \frac{\pi}{V\omega^2} \sum_{k,c,v} \left| \langle \psi_{kc} | \mathbf{u} \cdot \mathbf{p} | \psi_{kv} \rangle \right|^2 \delta(E_{kc} - E_{kv} - \omega)$$

方解石(CaCO₃; Calcite)

結晶構造



屈折率の異方性が大きい



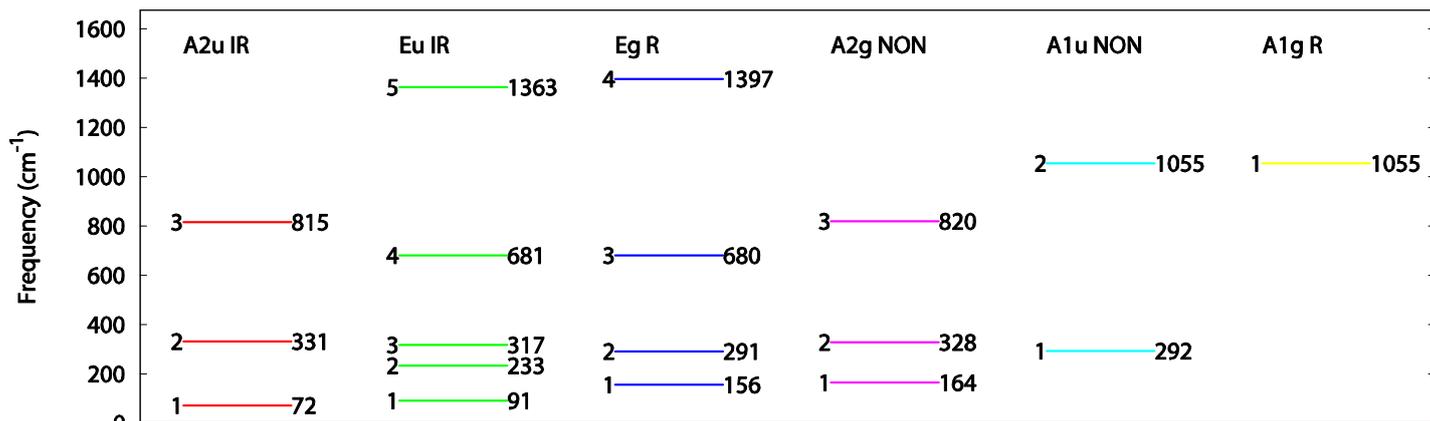
λ=589.3 nmにおいて
 $n_o=1.6584$
 $n_e=1.4864$
 E. Hecht, Optics 3rd ed.
 (Addison-Wesley, 1998)

Advance/PHASEで
 計算すると



λ=584.2 nmにおいて
 $n_o=1.6581$
 $n_e=1.4843$
 ただし、バンドギャップを補正
 (+2.5 eV)

方解石の振動解析



33 cm⁻¹ ≐ 1 THz ≐ 4.1 meV

実験値

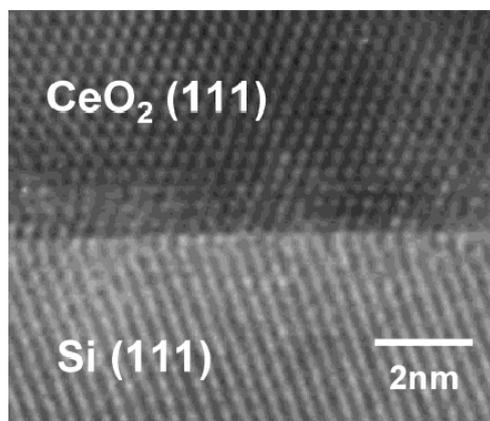
871	1417	1439	
316	713	720	1088
96	300	285	
	226	157	
	104		

「光物性基礎」 工藤恵栄著、オーム社（1996）

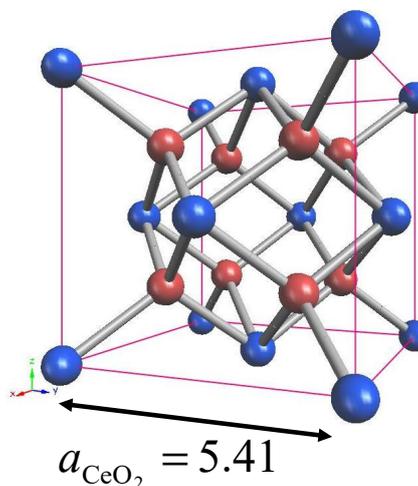
高誘電率 (ϵ - κ) 材料CeO₂ の結晶構造

Si(111) 基板の上にはCeO₂単結晶が成長する

(a)

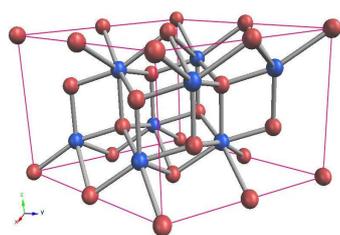


(b) CeO₂

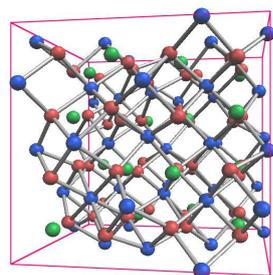


$$\frac{a_{\text{CeO}_2} - a_{\text{Si}}}{a_{\text{Si}}} = -0.35\% \longrightarrow \text{格子ミスマッチが非常に小さい}$$

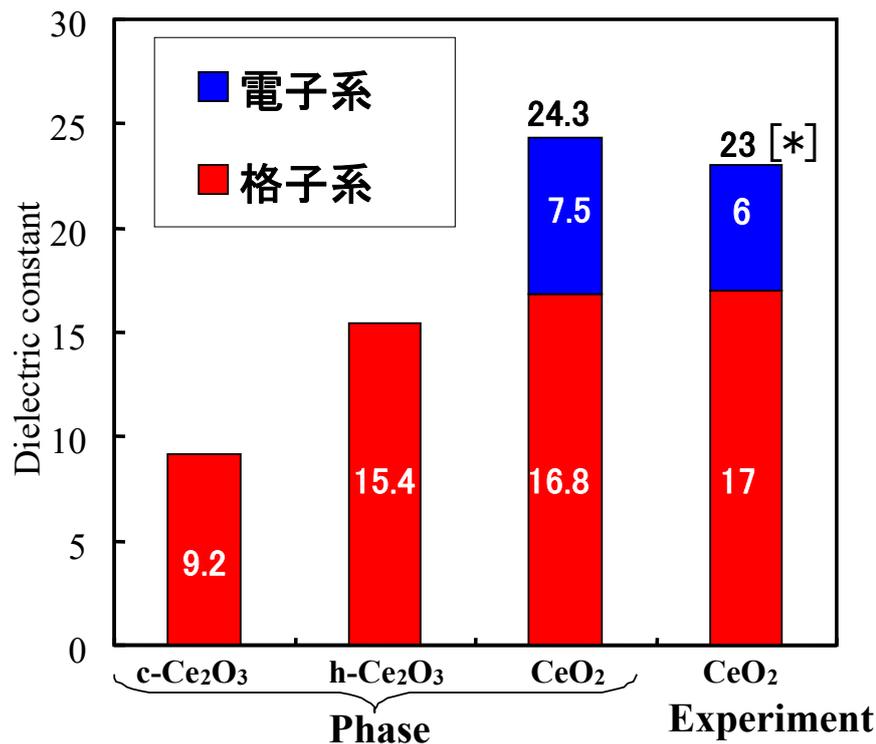
セリウム酸化物の誘電率



h-Ce₂O₃

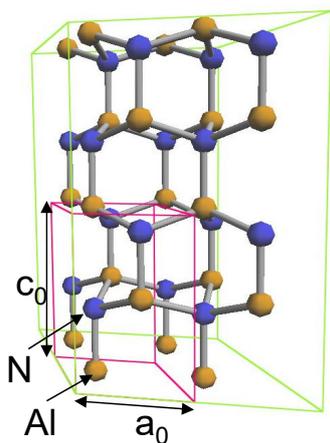


c-Ce₂O₃



[*] N. I. Santha et al., J. Am. Ceram. Soc., **87** (2004) 1233.

窒化アルミニウム(AIN)の圧電定数



Wurtzite構造の場合の e_{33} 成分の計算式

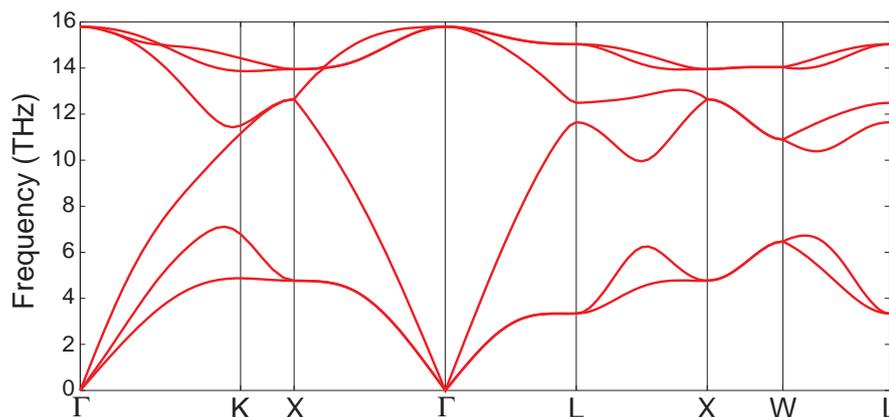
$$e_{33} = e_{33}^{(0)} + \frac{2c_0}{V_0} Z_{\parallel}^* \frac{du}{d\varepsilon_3}$$

	a_0 (bohr)	c_0/a_0	u_0	e_{33} (C/m ²)	$e_{33}^{(0)}$ (C/m ²)	Z_{\parallel}^*	$du/d\varepsilon_3$
PHASE	5.8064	1.601	0.3820	1.61	-0.40	-2.66	-0.19
Ref.	5.8140	1.619	0.3800	1.46	-0.47	-2.70	-0.18
Exp.	5.8777	1.601	0.3820	1.55			

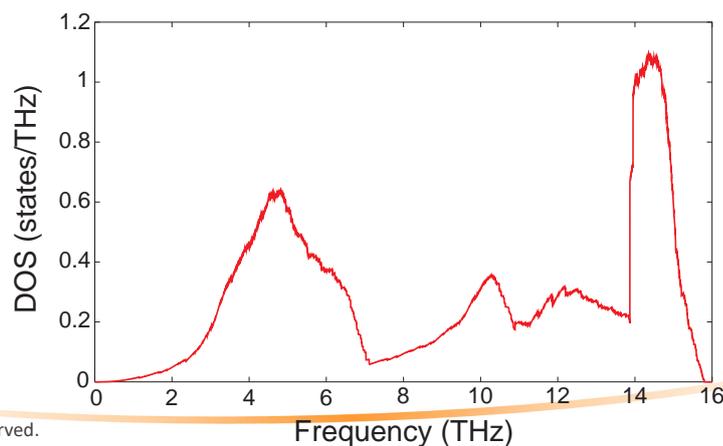
Ref.: Phys. Rev. B 56 (1997) R10024.

フォノン分散

Siの
フォノン分散



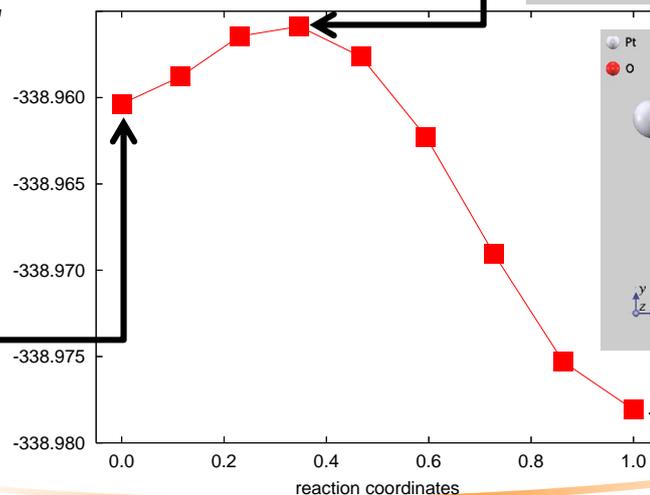
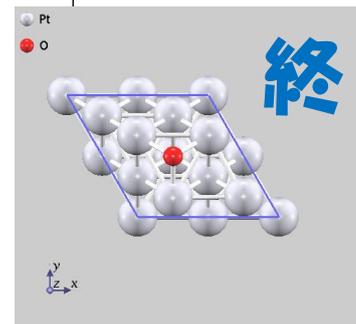
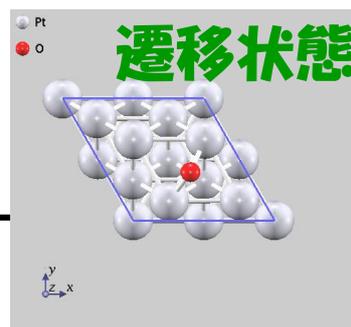
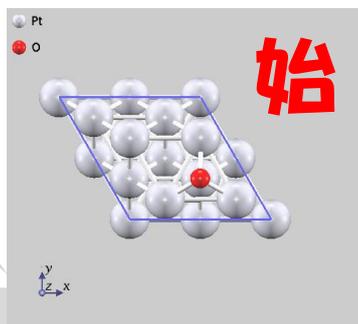
Siのフォノン
状態密度



Nudged Elastic Band (NEB)法

例題: Pt(111)上のO拡散

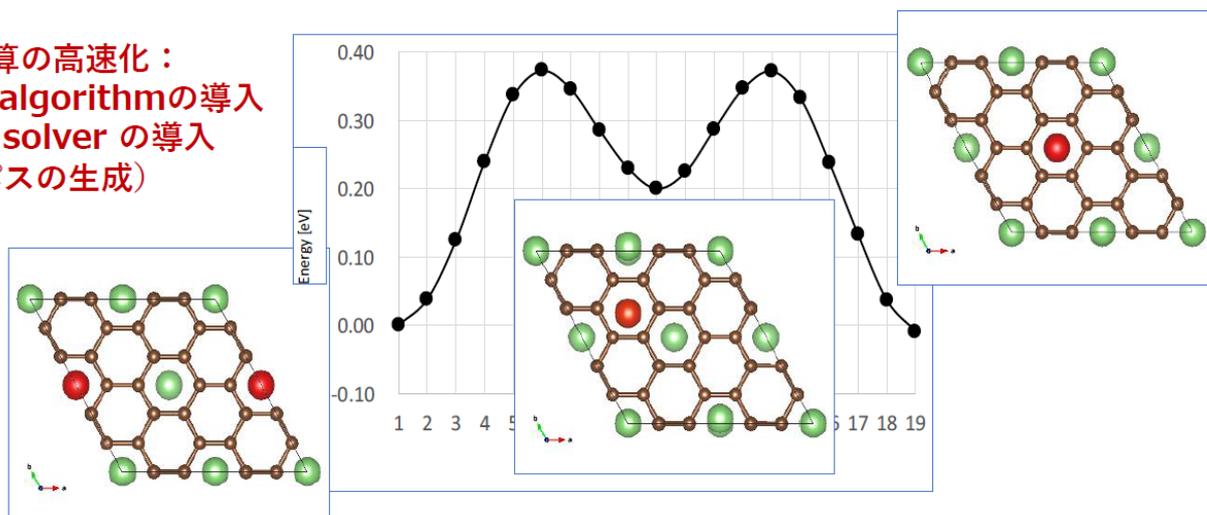
- 始状態と終状態を与える
- 中間状態を作る。隣接する状態は、バネでつながっている。
- 構造最適化



計算事例：NEB法による Li_4C_{24} - Li_3C_{24} でのLi原子の拡散過程の解析

NEB 計算の高速化：

- ・ FIRE algorithmの導入
- ・ IDPP solver の導入
(初期パスの生成)



NEB法による最小エネルギー経路探索において、従来のquenched MDは**1600~3000回**の繰り返し計算が必要だった結果に対して、Advance/PHASE最新版に導入したFIREアルゴリズムは**60~100回**程度の繰り返し計算で拡散経路を見つけることができた。

ソルバーの特徴機能紹介

- Effective Screening Medium(ESM)法
- XPS(光電子分光)
- EELS/XAFSシミュレーション
- 3D-RISM-SCF法(溶媒効果)
- 剛体シミュレーション(有機半導体)

ESM法について

- ▶ 大谷、杉野らによって開発された手法
 - M. Otani, O. Sugino, Phys. Rev. B **73** (2006) 115407.
 - <http://sugino.issp.u-tokyo.ac.jp/esm>
- ▶ 特徴
 - 非周期的スラブの取り扱い
 - 表面に平行な方向は周期的境界条件を適用
 - 表面に垂直な方向は**周期的境界条件を適用しない**
 - 周辺環境を考慮した計算
 - 表面が溶媒と接している
 - 付加電荷により、**帯電した表面**の扱い
 - 平行板コンデンサーとして、電場の影響を考慮

Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

仕事関数の計算

- Cu 001面
 - カットオフ 25Ry
 - 周期系での真空層 30 Å (ESM: 10 Å ~)

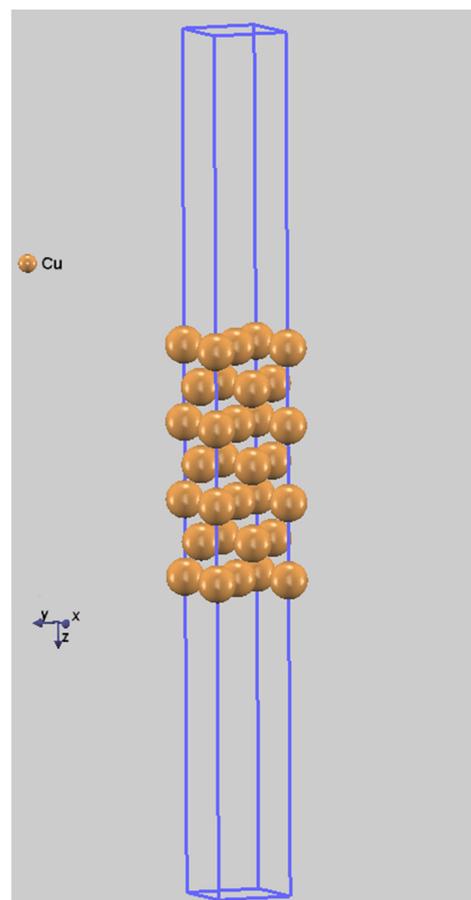
▶ 仕事関数

実験値 / eV	ESM法 / eV	周期系 / eV
4.65	4.60	4.10

▶ 計算時間 (Xeon 2.8GHz, 6core)

ESM法 / sec	周期系 / sec
240	727

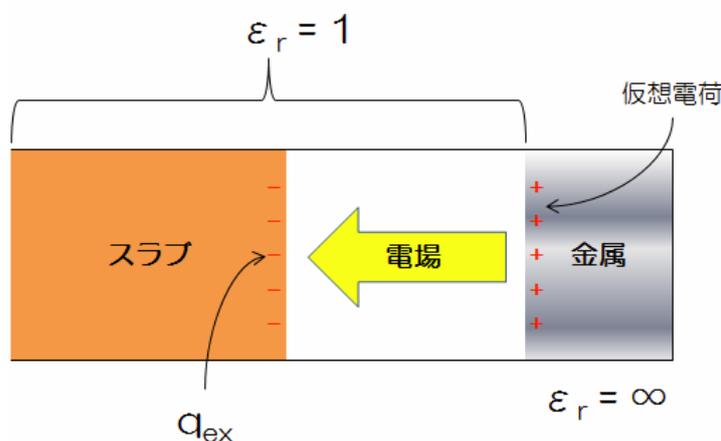
ESM法は、カットオフおよび真空層を小さく取ることが出来る。
⇒ **高速**



Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

電場の誘起 (電極のシミュレーション)

- スラブに電荷をドープすると、金属表面に仮想電荷が誘起
⇒ 平行板コンデンサーとして、電場が発生



Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

X線光電子分光 (XPS)

- 試料に単色X線を照射したときに放出される電子のエネルギーを測定する。



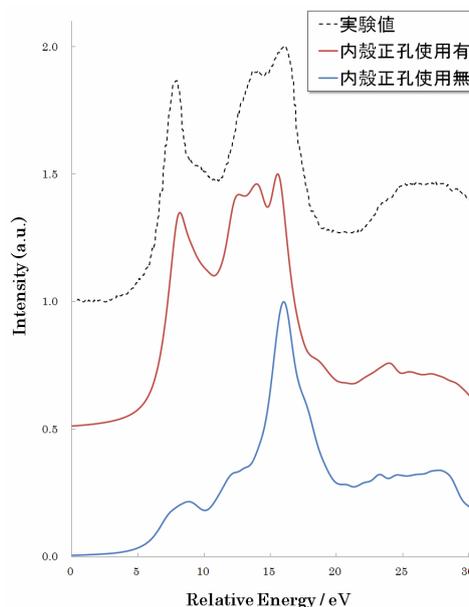
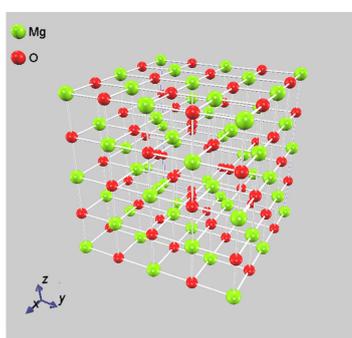
Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

EELS/XAFSシミュレーション

- ▶ 一電子近似を適用 (遷移金属酸化物は不可)
- ▶ 内殻正孔擬ポテンシャルを使用 (XPSと同じ要領)

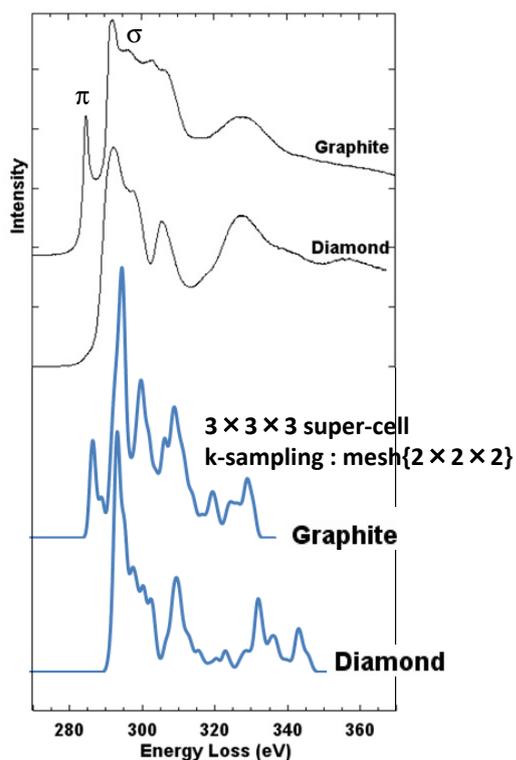
計算事例

- MgO

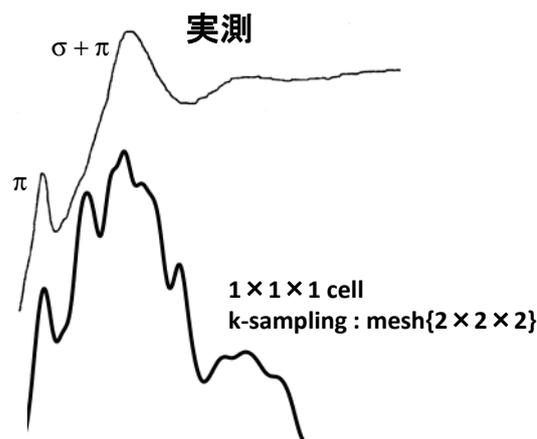
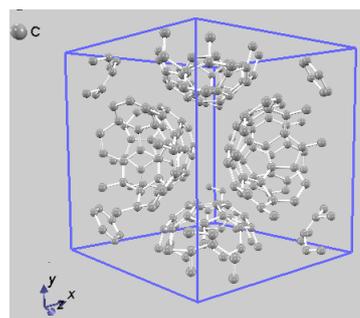


炭素のK-edge

- ▶ ダイヤモンド、グラファイト



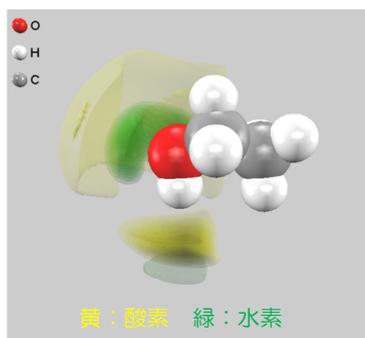
- フラーレン



3D-RISM-SCF法

- 溶液論(3D-RISM)と第一原理計算(SCF)の連成
- 溶媒を3D-RISM、溶質をSCFで取り扱う

▶ エタノール周辺の水の分布



- ▶ エタノール → SCF
- ▶ 水 → 3D-RISM

▶ 溶媒和(水和)自由エネルギー

計算値	-4.7 kcal/mol
実験値	-4.9 kcal/mol

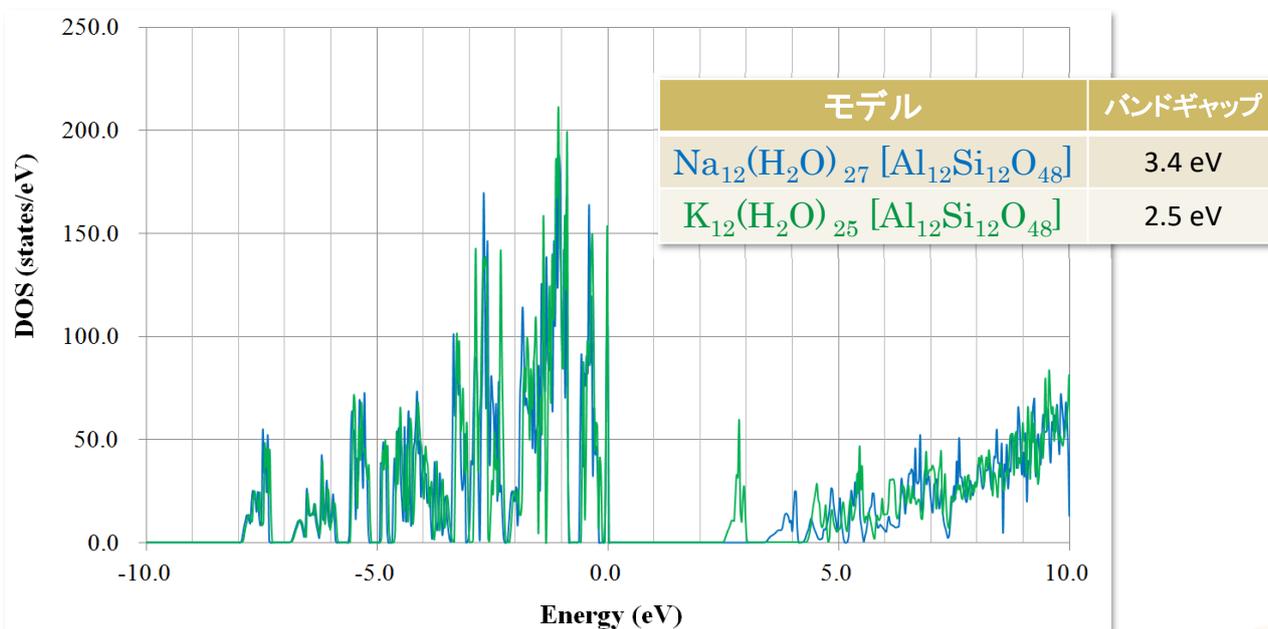
計算可能なシミュレーション

- ▶ 溶媒分布関数
 - 溶媒分子・イオンの吸着サイトを特定。
- ▶ 溶媒和自由エネルギー
 - 塩・極性分子の溶解に伴う、熱力学量を評価。
- ▶ 溶媒効果を考慮した全エネルギー
 - 溶媒存在下での安定性評価、ポテンシャル曲面を計算。
- ▶ 溶媒効果を考慮した構造最適化
 - 溶液中の分子等の安定構造を探索。
- ▶ 溶媒存在下でのバンド計算
 - 電子状態に対する溶媒の影響を調査。

A型ゼオライト

◎ 電子状態への影響

- ✓ 状態密度(DOS)の計算結果



Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

剛体シミュレーション (有機半導体)

Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

有機半導体(有機伝導体)の特徴

- 分子性結晶

分子内の力(intramolecular force): 強い

分子間の力(inter-molecular force): 相対的に弱い

- 計算の工夫が必要

結晶系ソフトにとって、**通常の計算手順**で有機半導体の計算が**難しい**であることが知られています。

(例) Quantum Espressoでの研究報告:

Calculating Band Structures for Organic Semiconductors

https://shareok.org/bitstream/handle/11244/317124/oksd_desilva_HT_2018.pdf

Quantum Espressoでの研究報告

Calculating Band Structures for Organic Semiconductors

Charith DeSilva

Oklahoma State University

Conclusion

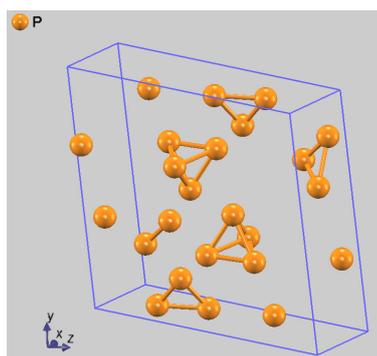
There is still a lot of future work to do done, in particular with finding a better method for calculating band structures as well as further work on finishing relaxation runs for the five molecules that did not finish. The band structures that were calculated in this project are not good for these type of organic semiconductors. The bands were very flat, flat bands mean there is not much movement in the electrons, meaning very little electrical conduction. This cannot be the case for these molecules, since they are well known thermoelectric materials, which have high electrical conductivity. This means that future research will need to start with a better band

通常の計算手順では構造最適化自体は難しいという結果です。

Advance/PHASEの特徴機能： 剛体(rigid body)のシミュレーション

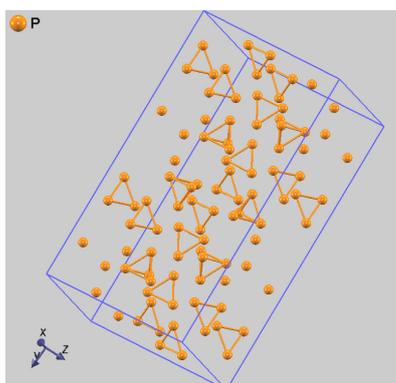
- ✓ Advance/PHASE には、所定の方法で指定された原子の組を剛体とみなし、そのトルクと重心に働く力を利用して緩和計算/分子動力学シミュレーションを行う機能があります。
- ✓ この機能を活用することによって、通常の緩和計算の場合時間のかかる、分子性結晶の緩和や表面への分子の吸着計算などを高速に行うことが可能となります。
- ✓ 最近の全固体電池の研究において、固体電解質としてクラスター結晶のような材料が有望であり、この機能の活用が期待されます。
- ✓ 実際の計算では、rigid bodyの計算のあとにfull relaxationの計算を行います。

分子性結晶における分子属性の自動判定



INFO - number of molecules auto-defined: 6

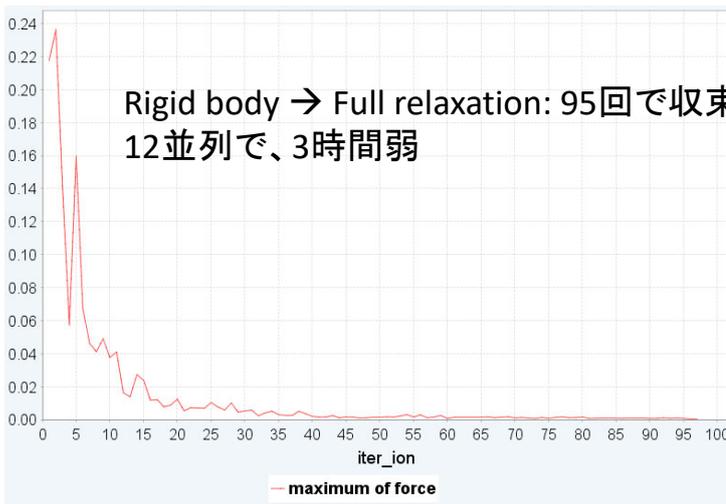
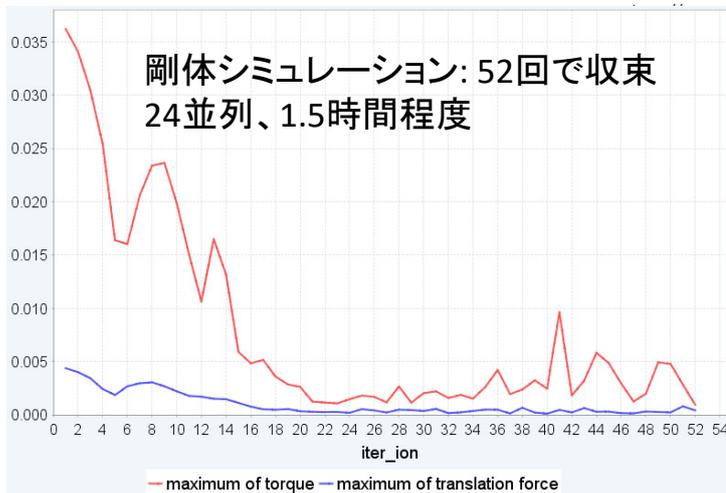
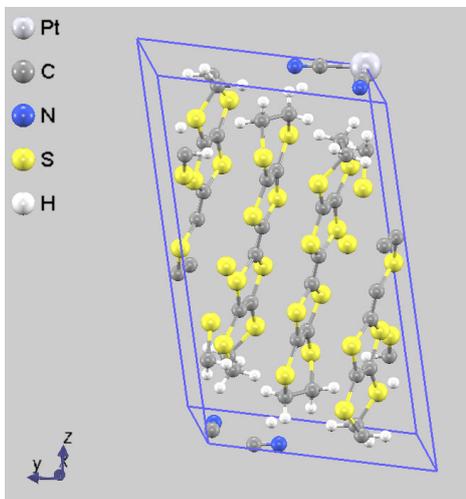
no.	element	rx	ry	rz	mobile	molecule
	<input type="checkbox"/> apply to all				<input type="checkbox"/> apply to all	<input type="checkbox"/> apply to all
1	P	1.0121099479	0.14518	0.31346	<input checked="" type="checkbox"/>	1
2	P	0.987889976	-0.1451800419	0.68654	<input checked="" type="checkbox"/>	2
3	P	1.0656299479	0.37416	0.63526	<input checked="" type="checkbox"/>	3
4	P	0.93437	0.62584	0.36474	<input checked="" type="checkbox"/>	4
5	P	1.0741899479	0.00247	0.17802	<input checked="" type="checkbox"/>	1
6	P	0.925809976	-0.0024700419	0.82198	<input checked="" type="checkbox"/>	2
7	P	1.1626299479	0.05123	0.68938	<input checked="" type="checkbox"/>	2
8	P	0.837369976	-0.0512300419	0.31062	<input checked="" type="checkbox"/>	1
9	P	1.2062399479	0.50581	0.35756	<input checked="" type="checkbox"/>	4
10	P	0.79376	0.49419	0.64244	<input checked="" type="checkbox"/>	3
11	P	1.2403399479	0.01126	0.37186	<input checked="" type="checkbox"/>	1



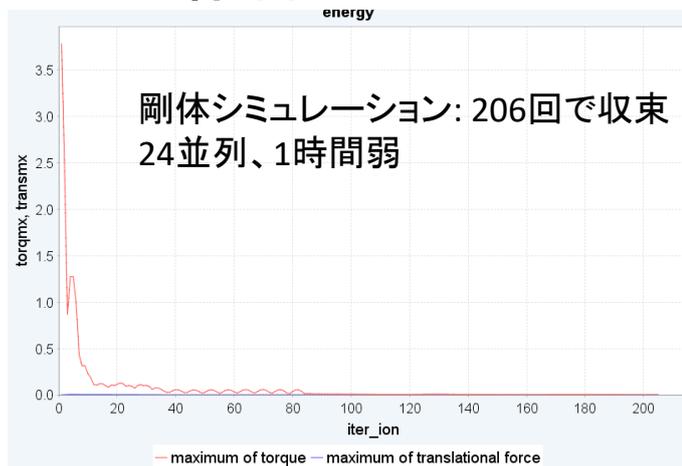
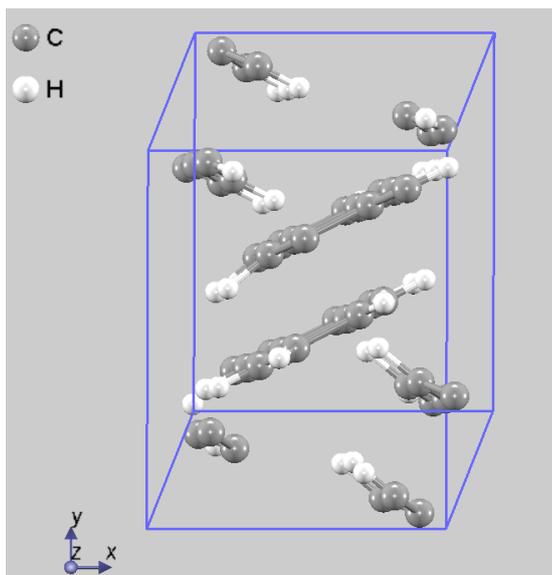
2x2 supercell

Number of molecules auto-defined: 24

構造計算例： BEDT-TTF_PtNO



構造計算例: pentacene結晶



補足説明: 最初からfull relaxationを実行すると、1日待っても収束していく様子が見られません。

正式対応プラットフォーム

- **Windows版 (64bit)**

Windows 8以上

単体PCに限定。

- **Linux版(AMD64/Intel 64)**

RedHat Enterprise Linux 7以上

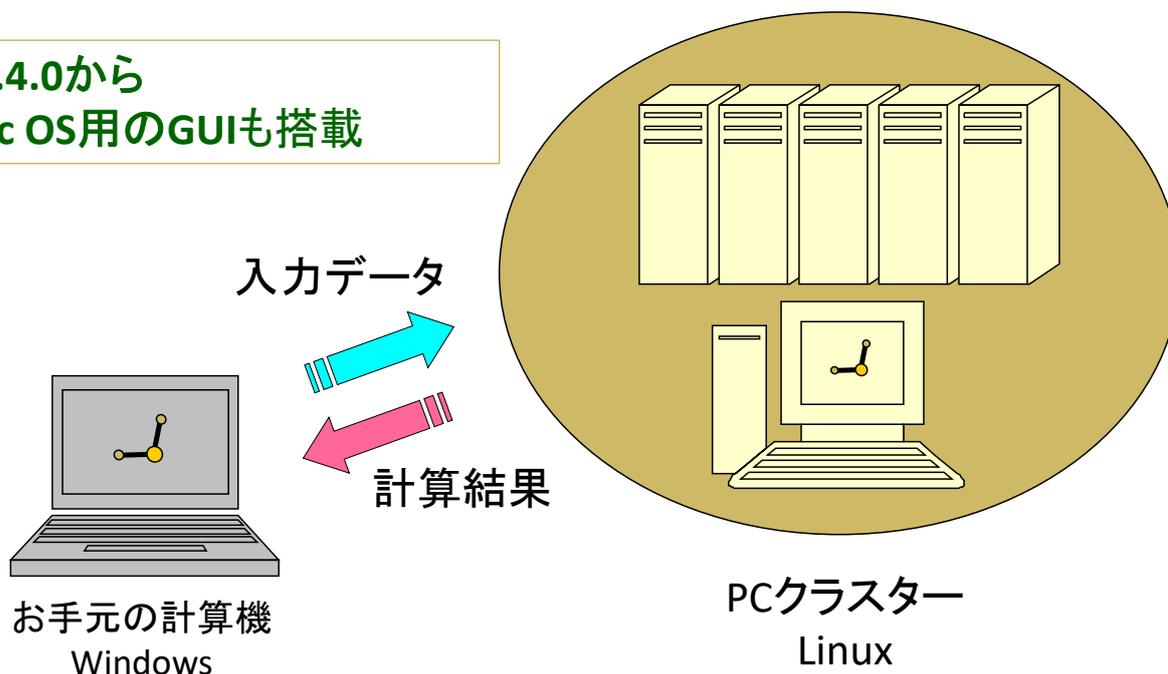
PCクラスターで
並列計算できます。

並列数に無制限

スパコンで実績多数

Linux版にはWindows用のGUIが 付属しています

Ver.4.0から
Mac OS用のGUIも搭載



専用GUI: PHASE Viewer

入力ファイルの自動生成・計算実行・結果取得・結果解析

□ 認証なし

何台のPCでもご自由に使える

□ 設定の自由度が大きい

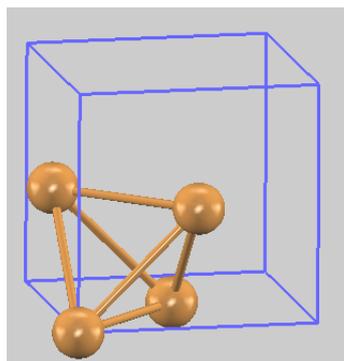
高精細対応(文字サイズ調整)

外観(配色)の変更

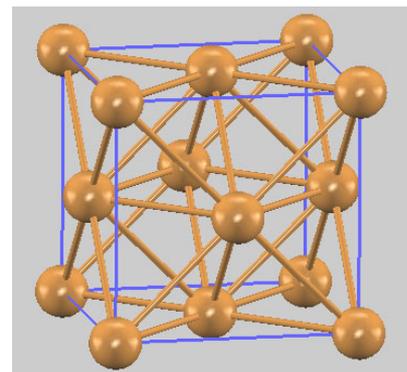
転送ファイル設定

Graphツール

3D出力, etc.



計算対象となるセル
(FCC: 4原子)



教科書通りの結晶構造表示
(境界原子を含む)

GUIの外観

The screenshot displays the PHASE Viewer GUI with several key components:

- projects:** A tree view on the left containing sample files like Si2, SCF, band, dos, eps, Fe, H-Si001, Cr, NaCl, zinc-blend, TiO2, iodine, CeO2, GaN, SiC, GaAs, and various test folders.
- AtomicConfigurationViewer nfcbr.cube:** A window showing a 3D model of a unit cell with a color-coded charge density map overlaid. A yellow label "電荷密度" (Charge Density) points to this view.
- AtomicConfigurationViewer nfdynm.data:** A window showing a 3D model of a crystal structure with force vectors represented by arrows. A yellow label "力のVector表示" (Force Vector Representation) points to this view.
- バンド構造 (Band Structure):** A window showing a plot of energy bands along high-symmetry paths (X-F-L-U-X).
- Brillouin zone:** A window showing the 3D Brillouin zone structure.
- 操作に関するヒント (Hints for Operation):** A status bar at the bottom containing information and a "clear log" button.

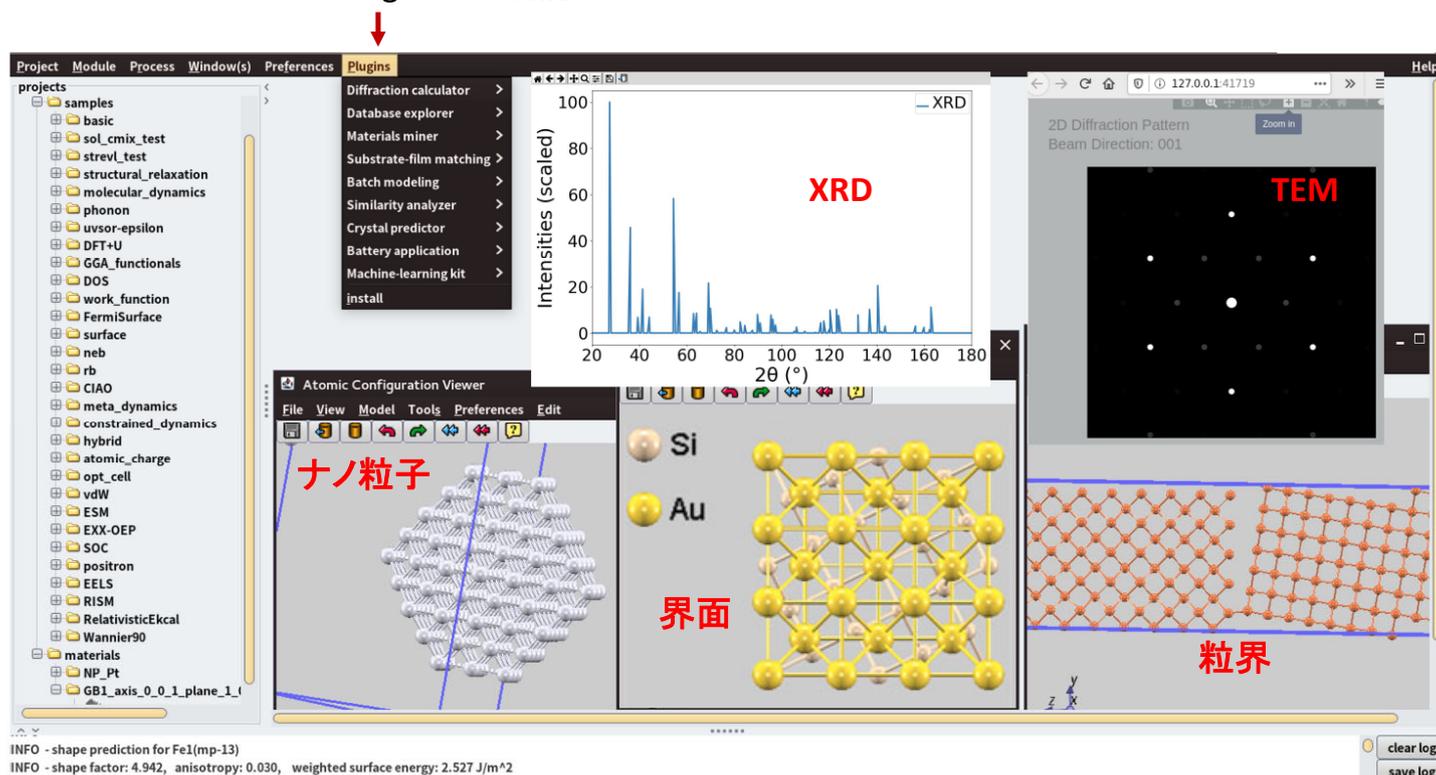
Advance/PHASE のマテリアル・インフォマティクス (MI) 関連機能

Ver.4.0 から

★MI 機能のリリース

- データベース検索: 結晶構造、バンド図、EELS、相図等
- データマイニング: 鉄鋼・磁性・誘電・圧電・熱電材料等のマイニング (ユーザ定義可)
- 整合界面の作成: 指定した膜材料の基板候補の探索、指定した膜・基板材料で整合する界面の作成
- バッチ・モデリング: 表面吸着・点欠陥構造の一括作成
- 実験データとの比較: XRD・中性子回折パターンの計算
- 結晶構造ツール: 構造類似性分析、新規結晶構造の予測
- 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

Plugins: MI機能



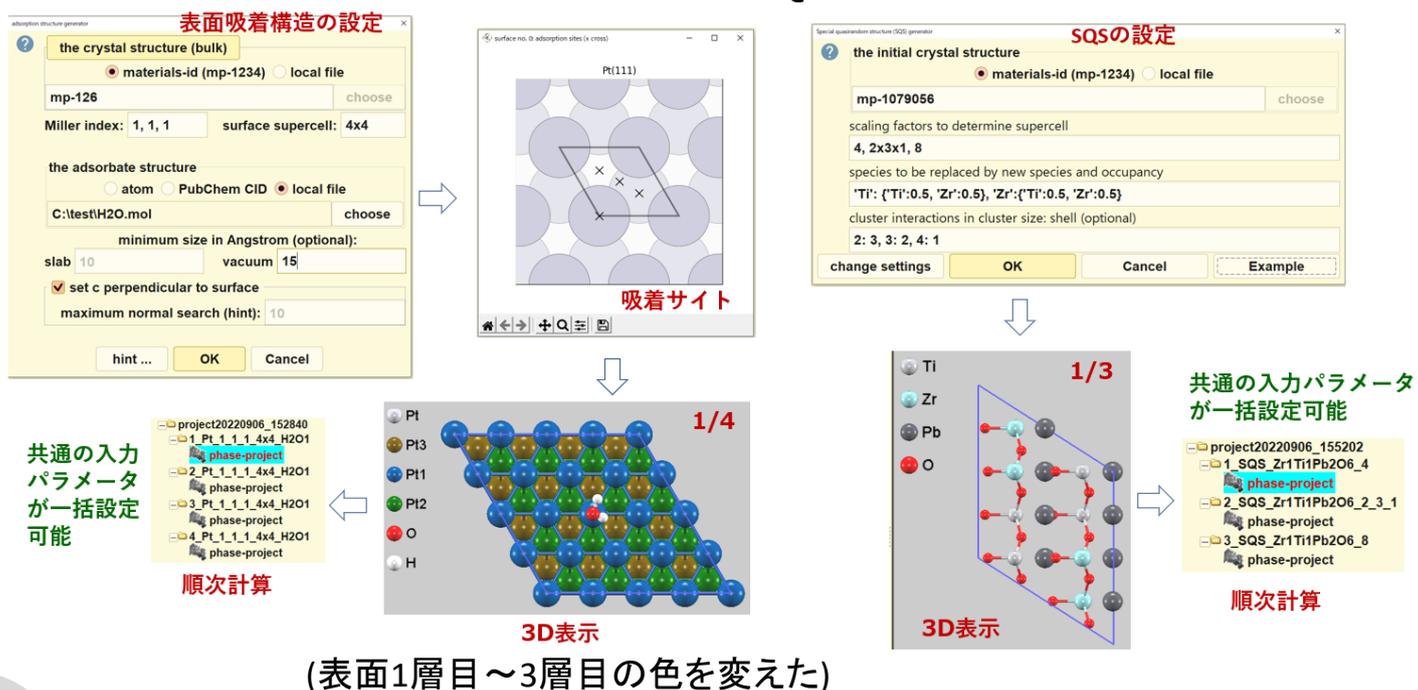
The screenshot displays the AdvanceSoft software interface with the 'Plugins' menu open, highlighting MI-related functions. The interface includes several panels:

- Plugins Menu:** Lists various tools such as 'Diffraction calculator', 'Database explorer', 'Materials miner', 'Substrate-film matching', 'Batch modeling', 'Similarity analyzer', 'Crystal predictor', 'Battery application', and 'Machine-learning kit'.
- XRD Plot:** A graph showing 'Intensities (scaled)' versus '2θ (°)' with a prominent peak at approximately 45 degrees, labeled 'XRD'.
- TEM Image:** A 2D Diffraction Pattern showing a grid of spots, labeled 'TEM'.
- Atomic Configuration Viewer:** A 3D model of a crystal structure showing a 'Nano particle' (ナノ粒子) and an 'Interface' (界面) between Silicon (Si) and Gold (Au) atoms.
- Grain Boundary:** A 3D model of a grain boundary (粒界) between two different crystal orientations.

At the bottom of the interface, there is a status bar with the following information:

```
INFO - shape prediction for Fe1(mp-13)
INFO - shape factor: 4.942, anisotropy: 0.030, weighted surface energy: 2.527 J/m^2
```

MI機能の活用事例：表面吸着構造・SQS構造の一括作成と順次計算



ご清聴ありがとうございました。

お気軽にお問い合わせください。

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE ver. 4.3 新機能について

第1事業部 技術第1部 胡 春平

「オンラインセミナー」Advance/PHASE 製品紹介セミナー
2023年1月27日（金）
アドバンスソフト株式会社

今回のバージョンアップについて

✓ MI機能の更なる開発

(機能増強・改良)

- データベース検索
- 基板・膜のマッチング
- バッチ・モデリング
- 結晶予測
- 機械学習

✓ 第三者ソフトとの連携

- OCP (open catalyst project):
構造最適化の加速化

✓ ソルバーの改良

- (1) MPIライブラリの更新
- (2) 並列化自動設定機能の導入
- (3) 構造最適化アルゴリズムの追加

✓ GUIの改良

- (1) Berry phase計算へのGUI対応
- (2) ワークフロー機能の開発
- (3) MSD・拡散係数の計算
- (4) NEB 計算途中の反応パスの編集
- (5) 原子属性の継承・利用
- (6) all frameへの適用機能の導入
- (7) RedHat Linux 9への対応
- (8) 操作性向上など、改良多数

リリース時期: 2023年4月

MI機能の更なる開発

MI機能の改良点

- **データベース検索:**
Materials Projectの更新への対応、オプション追加
- **基板・膜のマッチング:**
general interface builderの不具合解消・機能増強
- **バッチ・モデリング:**
adsorption structure generatorの改良、吸着構造の一括編集
point defect generatorの速度向上、仕様改善
- **結晶予測:**
shape predictorの六方晶指数への対応
- **機械学習:**
分子性質予測機能の追加

Materials Project更新への対応

- Materials Projectは現在、新しいウェブサイトへの移行中。
- New APIを採用し、以前のAPIをlegacy APIにした。

new API:

new API key (32桁)を使用し、新しいデータベースに接続。
ただし、まだβ版である。

legacy API:

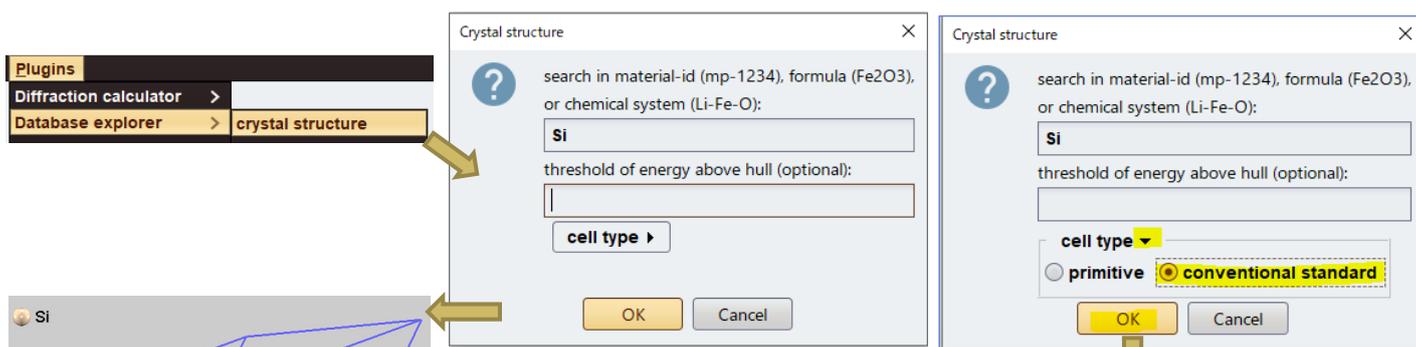
legacy API key (16桁)を使用し、以前のデータベースに接続。

Advance/PHASE ver.4.2: legacy API keyのみに対応

<https://legacy.materialsproject.org> からAPI keyを取得する必要あり

Advance/PHASE ver.4.3: new/legacy API keyの両方に対応する

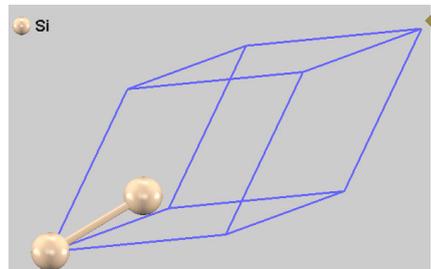
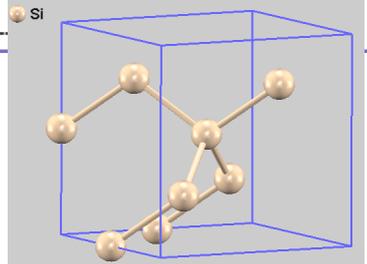
データベース検索： 結晶構造取得時のオプション追加



The screenshot shows the 'Crystal structure' search dialog box. The search criteria are: 'Si', 'threshold of energy above hull (optional):', and 'cell type'. The 'cell type' dropdown is set to 'conventional standard' (highlighted in yellow). The 'OK' button is also highlighted in yellow.

```

INFO - ----- start of crystal structure search for Si -----
INFO -
INFO - structure found: Si8  materials id: mp-149  energy above hull: 0  index: 1
INFO -
INFO - totally 1 structure(s) found with lowest energy above hull = 0
INFO -
INFO - ----- end of crystal structure search for Si -----
  
```

The image shows two 3D ball-and-stick models of the Silicon crystal structure. The left model shows the structure within a unit cell, and the right model shows the structure within a unit cell. The models are labeled 'Si' and 'Si2' respectively.

General interface builderの改良

☑ インターネット未接続時のlocal file使用問題を解消した。

Python library (MIT license)の修正

☑ 一部のdefault設定がGUIで変更できるようになった。

☑ Linuxでのファイル名の空白問題に対応した。

作成例: GaN(001)/Si(001)界面

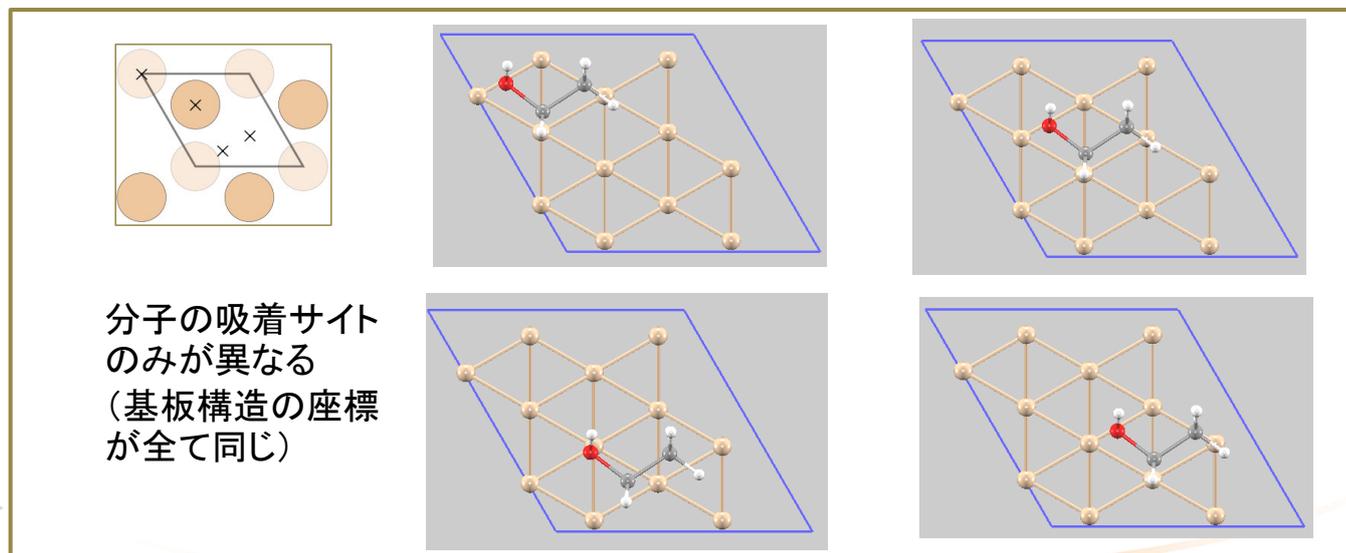
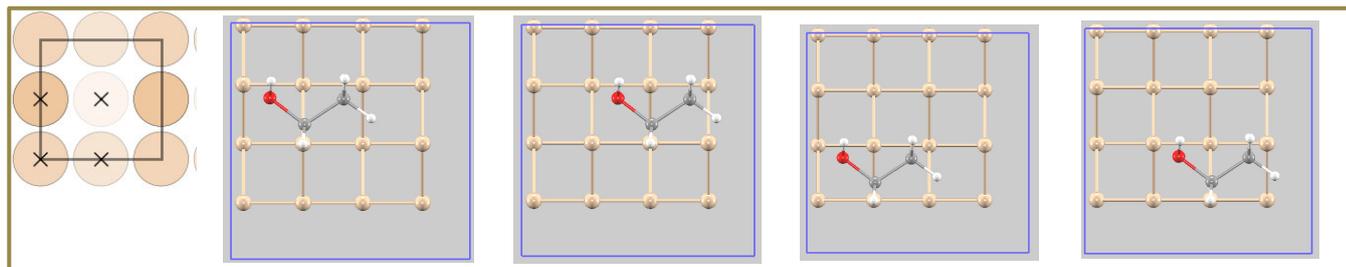
The screenshot shows the 'General Interface builder' window. It has two main sections: 'the substrate structure (bulk)' and 'the film structure (bulk)'. Both sections have radio buttons for 'materials-id' and 'local file'. The substrate is set to 'mp-804' with Miller index '0, 0, 1' and minimum slab thickness '10'. The film is set to 'mp-149' with Miller index '0, 0, 1' and minimum slab thickness '10'. A 'vacuum thickness in angstrom' of '20' is also specified. A 'settings for lattice matching (optional)' dialog is open, showing parameters like 'maximum area in lattice matching' (500), 'maximum mismatch of lattices' (0.05), 'maximum angle difference' (1), 'area ratio tolerance' (0.01), and 'separation at interface (in angstrom)' (2). To the right, a 3D model shows a GaN slab on a Si substrate within a blue wireframe box.

adsorption structure generatorの改良

The diagram illustrates the workflow for generating adsorption structures. It is divided into two rows. The top row shows a '2x2スーパーセル' (2x2 supercell) starting from a 'ユニットセル' (unit cell) of green spheres. It shows a 2x2 grid of unit cells, a 3D model of the supercell with a red and white molecule adsorbed, and the final periodic structure. The bottom row shows a '3x3スーパーセル' (3x3 supercell) starting from a 'ユニットセル' (unit cell) of orange spheres. It shows a 3x3 grid of unit cells, a 3D model of the supercell with a red and white molecule adsorbed, and the final periodic structure. Yellow arrows indicate the flow from unit cell to supercell, then to 3D model, and finally to the periodic structure.

分子をセルの中に置くように、生成した**全ての吸着構造に対して同じperiodic translation**の操作を実施

吸着構造の生成例



吸着構造に対する一括編集

一部の原子層の固定

edit multiple atoms

general rotation

translation

x (Å) 0.0 y (Å) 0.0 z (Å) 0.0

attributes

element mobile weight 1

aldos num_layer thermo_group

proj_group

mobility

vy

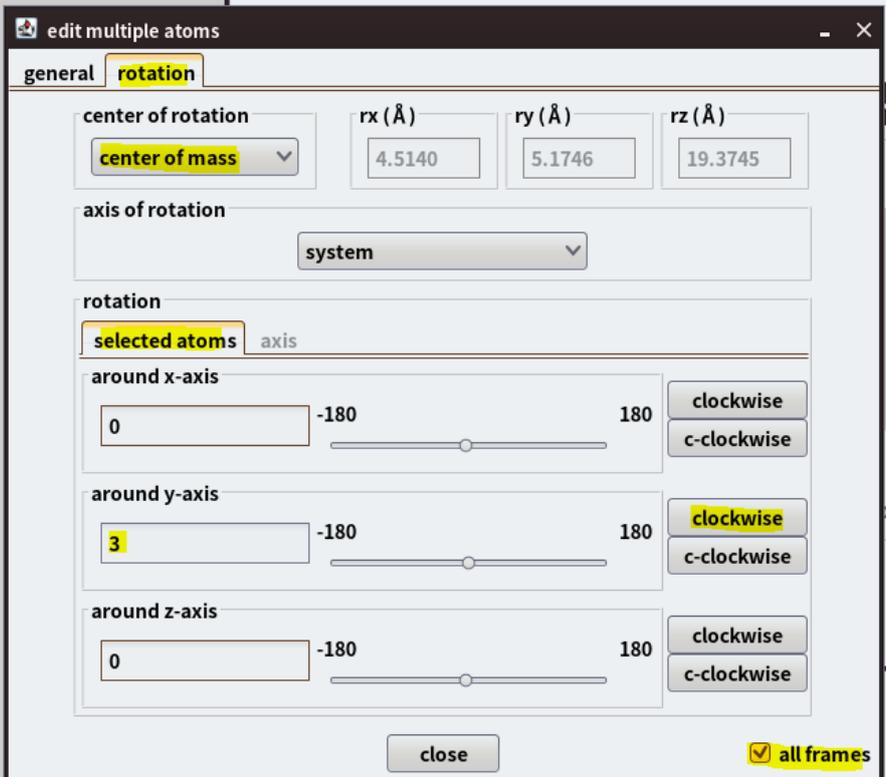
information

When "all frames" is selected, the operation will be applied to all frames, for those atoms with the same atomic indices as in the current frame.

close all frames

all frameオプションの適用による一括操作

吸着分子の配置(任意方向での並進移動、任意角度での回転)を一括的に設定することが可能。



The screenshot shows the 'edit multiple atoms' dialog box with the 'rotation' tab selected. The 'center of rotation' is set to 'center of mass' with coordinates (4.5140, 5.1746, 19.3745). The 'axis of rotation' is set to 'system'. The rotation settings are as follows:

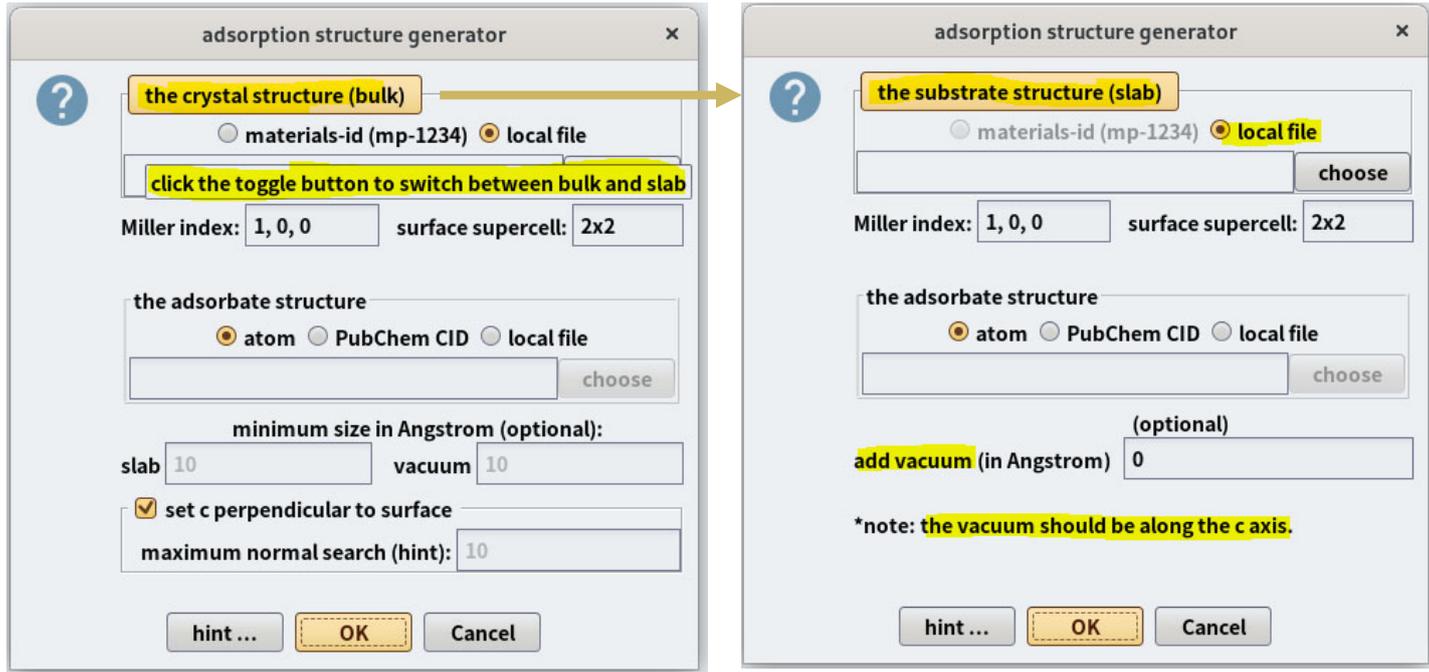
Axis	Angle (degrees)	Direction
around x-axis	0	c-clockwise
around y-axis	3	clockwise
around z-axis	0	c-clockwise

The 'all frames' checkbox is checked, indicating that the rotation settings will be applied to all frames of the simulation.

Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

11

スラブ構造から吸着構造の作成



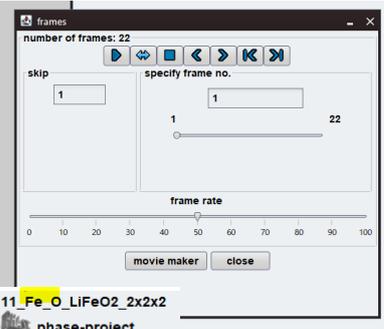
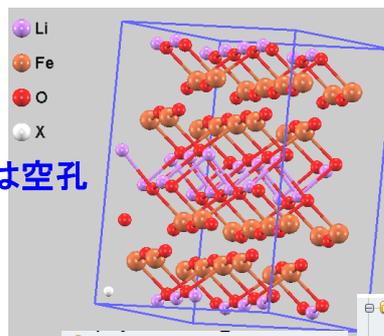
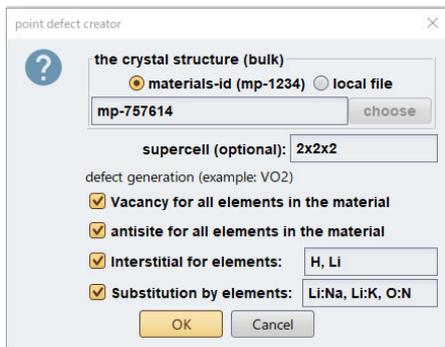
The image shows two screenshots of the 'adsorption structure generator' dialog box. The left screenshot shows the 'the crystal structure (bulk)' tab selected, and the right screenshot shows the 'the substrate structure (slab)' tab selected. An arrow points from the 'bulk' tab to the 'slab' tab, indicating the transition from bulk to slab structure.

In the 'the crystal structure (bulk)' tab, the 'local file' radio button is selected, and a yellow box highlights the text 'click the toggle button to switch between bulk and slab'. The 'the adsorbate structure' section has 'atom' selected. The 'minimum size in Angstrom (optional)' section has 'slab' set to 10 and 'vacuum' set to 10. The 'set c perpendicular to surface' checkbox is checked, and the 'maximum normal search (hint)' is set to 10.

In the 'the substrate structure (slab)' tab, the 'local file' radio button is selected. The 'the adsorbate structure' section has 'atom' selected. The 'add vacuum (in Angstrom) (optional)' field is set to 0. A note at the bottom states: '*note: the vacuum should be along the c axis.'

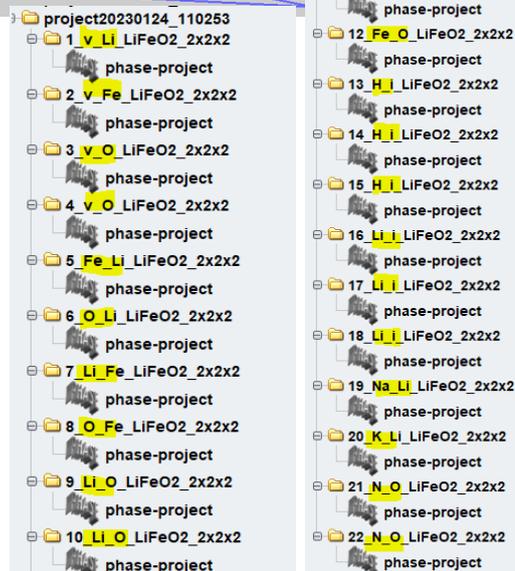
Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

Point defect generator: 欠陥生成の速度を向上



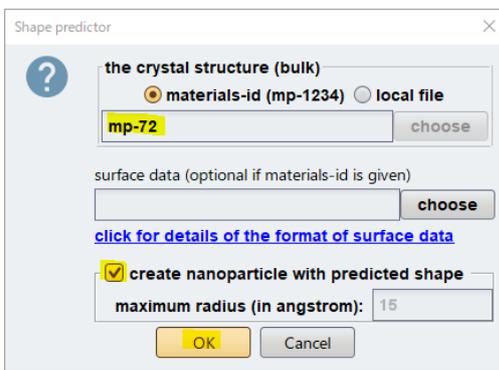
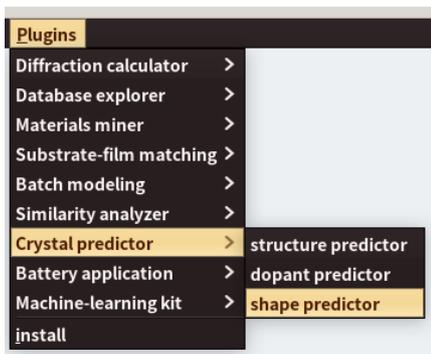
```
INFO - defect generation for Li4 Fe4 O8 starts ...
INFO -
INFO - no. 1: v_Li, defect site: [0.250001 0.10486 0. ] Li1
INFO - no. 2: v_Fe, defect site: [0.75 0.646333 0.500006] Fe1
INFO - no. 3: v_O, defect site: [0.5 0.397638 0.249999] O1
INFO - no. 4: v_O, defect site: [0.500003 0.855759 0.249998] O1
INFO -
INFO - no. 5: Fe_Li, defect site: [0.250001 0.10486 0. ] Fe0+1
INFO - no. 6: O_Li, defect site: [0.250001 0.10486 0. ] O0+1
INFO - no. 7: Li_Fe, defect site: [0.75 0.646333 0.500006] Li0+1
INFO - no. 8: O_Fe, defect site: [0.75 0.646333 0.500006] O0+1
INFO - no. 9: Li_O, defect site: [0.5 0.397638 0.249999] Li0+1
INFO - no. 10: Li_O, defect site: [0.500003 0.855759 0.249998] Li0+1
INFO - no. 11: Fe_O, defect site: [0.5 0.397638 0.249999] Fe0+1
INFO - no. 12: Fe_O, defect site: [0.500003 0.855759 0.249998] Fe0+1
INFO -
INFO - generating interstitial defects (this may take time) ...
INFO - no. 13: H_i, defect site: [0.88503311 0.87549107 0.36481999] H0+1
INFO - no. 14: H_i, defect site: [0.63519105 0.62496609 0.11465828] H0+1
INFO - no. 15: H_i, defect site: [0.52274655 0.73945948 0.99906915] H0+1
INFO - no. 16: Li_i, defect site: [0.88503311 0.87549107 0.36481999] Li0+1
INFO - no. 17: Li_i, defect site: [0.63519105 0.62496609 0.11465828] Li0+1
INFO - no. 18: Li_i, defect site: [0.52274655 0.73945948 0.99906915] Li0+1
INFO -
INFO - no. 19: Na_Li, defect site: [0.250001 0.10486 0. ] Na0+1
INFO - no. 20: K_Li, defect site: [0.250001 0.10486 0. ] K0+1
INFO - no. 21: N_O, defect site: [0.5 0.397638 0.249999] N0+1
INFO - no. 22: N_O, defect site: [0.500003 0.855759 0.249998] N0+1
INFO -
INFO - defect generation for Li4 Fe4 O8 ... done
INFO -
INFO - creating 2x2x2 supercell for defect Li4 Fe4 O8 ... done
.....
```

Xは空孔

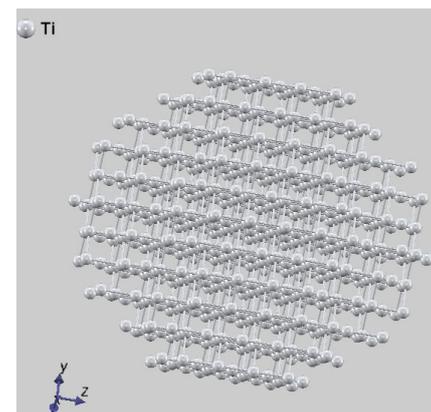
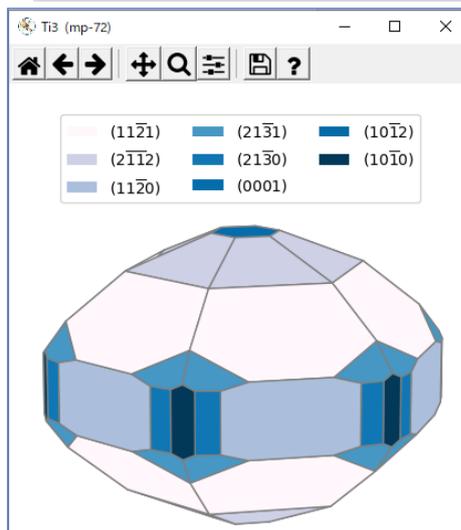


欠陥のname: 簡単になった

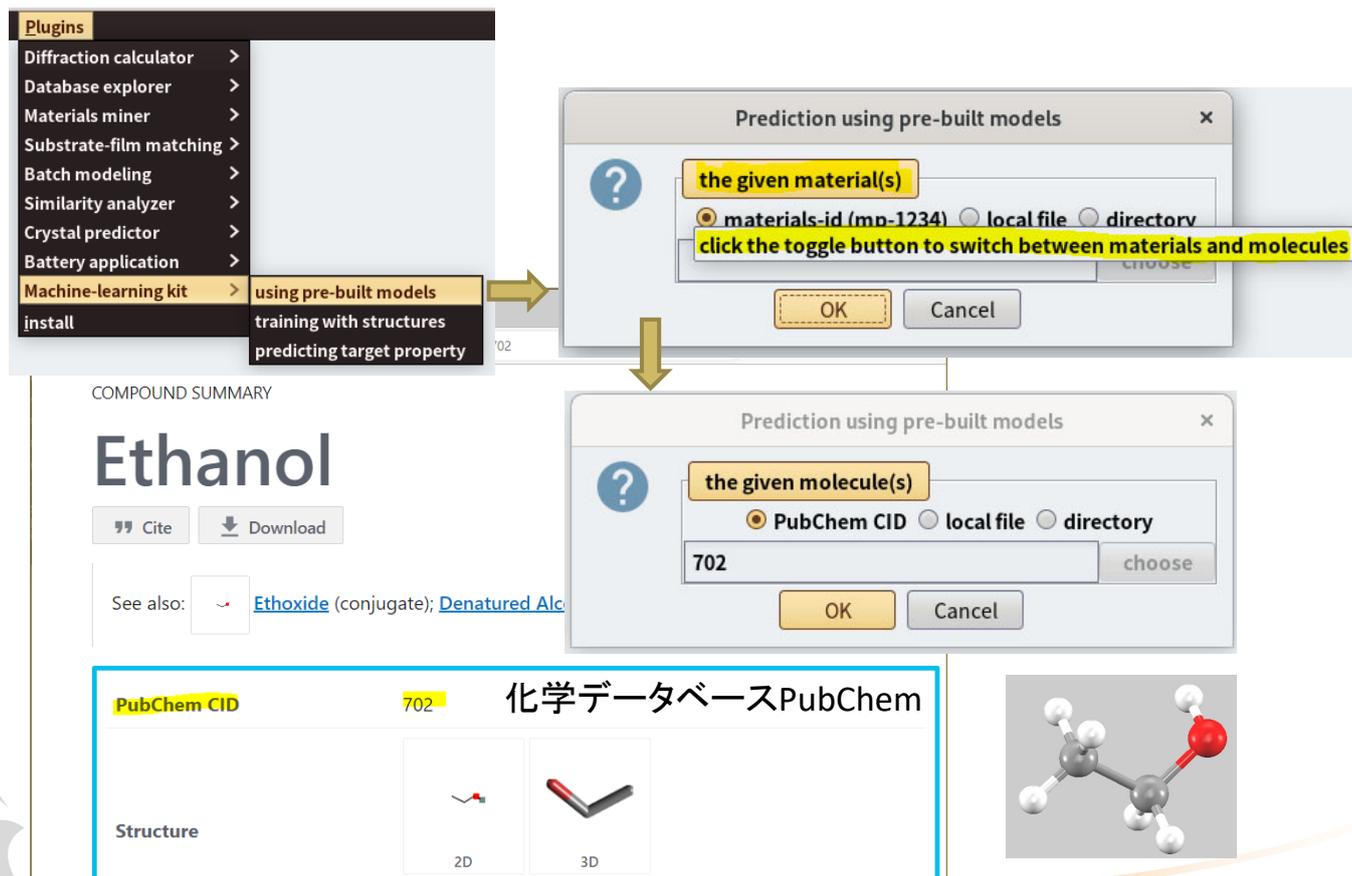
Shape predictor: 六方晶指数への対応



	miller_index	surface_energy
0	(1, 0, -1, 2)	2.155622
1	(0, 0, 0, 1)	2.152215
2	(1, 1, -2, 1)	1.931873
3	(1, 0, -1, 0)	2.219034
4	(2, -1, -1, 2)	2.005561
5	(2, 1, -3, 1)	2.101265
6	(2, 2, -4, 1)	2.143423
7	(2, 1, -3, 0)	2.138852
8	(2, 1, -3, 2)	2.077977
9	(1, 1, -2, 0)	2.035417
10	(2, 0, -2, 1)	2.263789
11	(1, 0, -1, 1)	2.251539



Machine-learning kit: 分子性質予測機能の追加



COMPOUND SUMMARY

Ethanol

See also: [Ethoxide](#) (conjugate); [Denatured Alc...](#)

PubChem-CID 702 化学データベースPubChem

Structure

2D 3D

Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

15

分子性質の予測例

The given structure: 702

Predicted molecular properties of compound CID: 702 (ethanol, C₂H₆O)

HOMO	-7.176	eV	HOMO : -7.1266
LUMO	2.122	eV	LUMO : 2.1715
gap	9.381	eV	gap : 9.2981
ZPVE	2.177	meV	ZPVE : 2.1702
μ	1.440	Debye	mu : 1.4131
α	27.769	Bohr ³	alpha : 27.87
<R ² >	189.531	Bohr ²	R ² : 193.1659
UO	-33.065	eV	Cv : 13.546
U	-33.316	eV	omega1 : 3829.9632
H	-33.479	eV	
G	-30.821	eV	
Cv	13.240	cal/(molK)	
ω_1	3661.368	cm ⁻¹	

DFT 結果

omega1は構造に敏感

For technical details, please refer to:

Ref. [1] <https://github.com/materialsvirtuallab/megnet>

Ref. [2] Graph Networks as a Universal Machine Learning Framework for Molecules and Crystals, Chem. Mater. 31, 3564 (2019). <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b01294>

Ref. [3] **It is not recommended to use molecules outside the QM9 datasets.** QM9: Quantum chemistry structures and properties of 134 kilo molecules, Sci. Data 1, 140022 (2014). <https://doi.org/10.1038/sdata.2014.22>

QM9データセット (分子数: 13.4万) 以外は推奨しない

Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

ソルバーの改良

MPIライブラリの更新： Intel oneAPI 2021の使用

- Intel MPIのバージョンによる問題点
Intel MPI 2018: 一部のLinux計算機 (RHEL 8)で実行できない
Intel MPI 2019: ノード間並列化に問題あり

Intel MPI 2021: 上記問題を解決した。
Windows & Linuxで動作確認済。

- Ver.4.3: Intel oneAPI 2021のMPI配布版を同梱する

MPI並列自動設定機能の導入

DFT計算において、 k 点並列の効率が高いため、**優先的に k 点並列を設定**するのが原則である。

自動化計算において、系によって k 点数が異なる可能性があるため、コア数のみを設定して、 k 点並列数を優先的に設定する上でバンド・ k 点の並列数を自動的に決定する機能が望ましい。

➡ Ver.4.3 で導入した。

ne(バンド並列数), nk (k 点並列数)の自動設定

(例)

test/scf, k 点数は4

np=32 → ne=8 nk=4

np=24 → ne=6 nk=4

test/band, k 点数は288

np = 64 → ne=2 nk=32

np = 56 → ne=2 nk=28

np = 32 → ne=1 nk=32

np = 24 → ne=1 nk=24

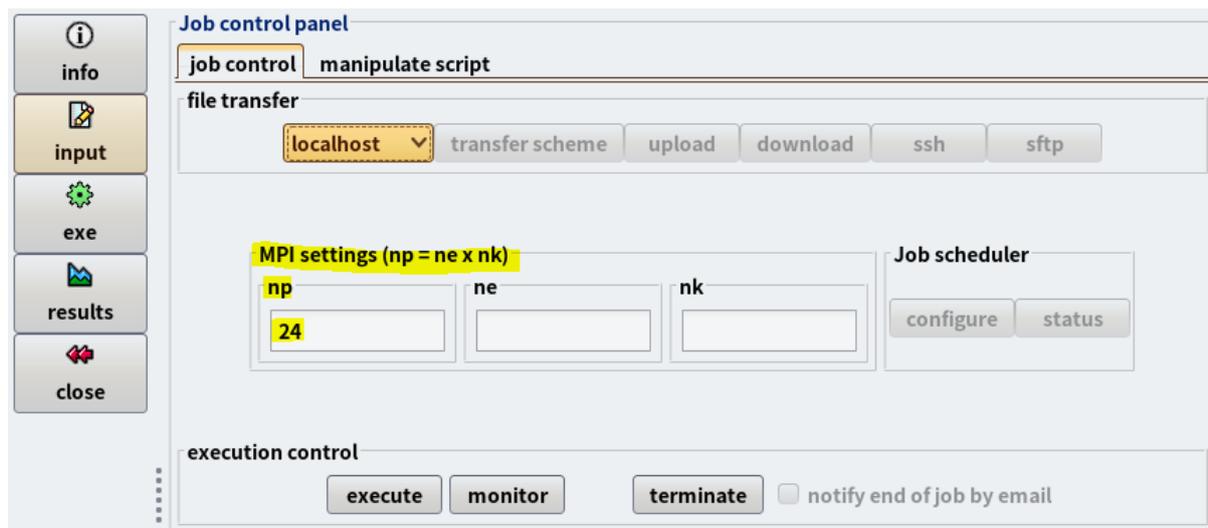
test/eps, k 点数は19

np=24 → ne=6 nk=4

np=38 → ne=2 nk=19

np=57 → ne=3 nk=19

GUI: MPI settings



イメージ並列化を有効にしたとき、nr (イメージ並列数)を手動で設定する必要あり

構造最適化アルゴリズムの追加: FIRE

- Fast Inertial Relaxation Engine (FIRE) algorithm

Structural Relaxation Made Simple

<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.170201>

E Bitzek 著 - 2006 - [被引用数: 781](#) - [関連記事](#) (2019/09/26時点)

被引用数: 1451 (2023/01/27時点)

実装式のみならず、原子の可動属性(mobile)と最大変位量(dx_max)も考慮

Ver.4.0からNEB計算に導入した

samples/NEB/Si001_H2:

特徴: dtは自動調整、安定感抜群

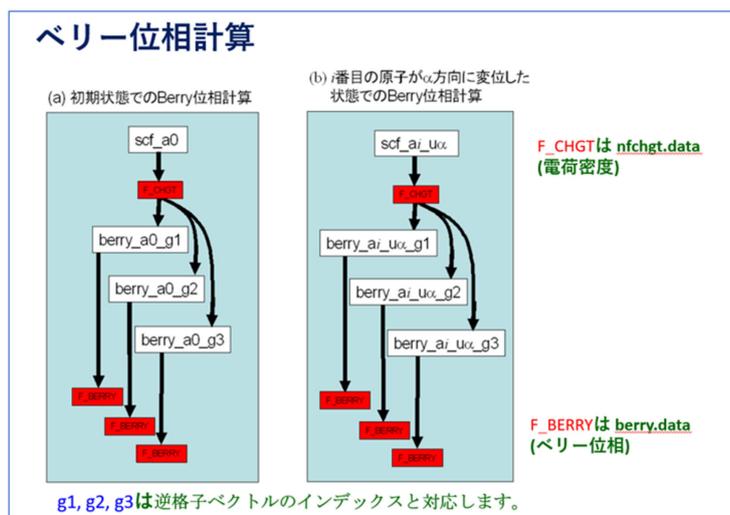
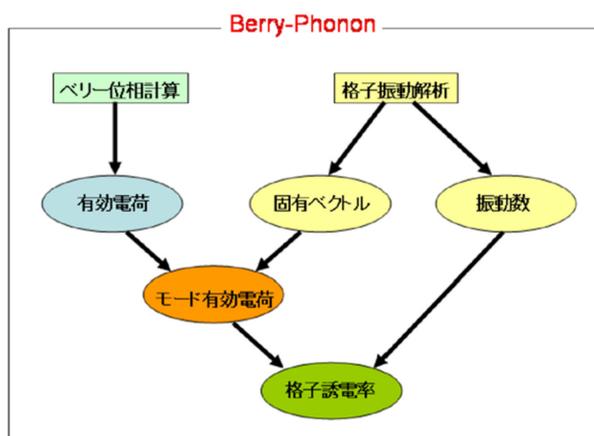
dt = 1. a.u ~ 1000 a.u., FIREで30数回~50数回で収束

(quenched MDはdtの設定によりループ数が大きく変わる)

Ver.4.3から構造最適化計算にも使えるようになる。

GUIの改良

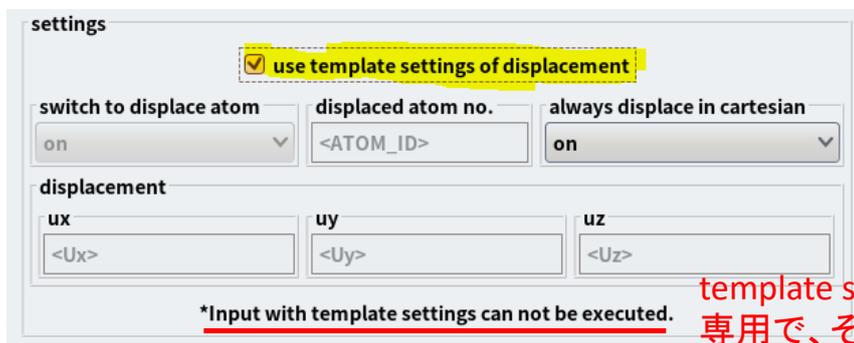
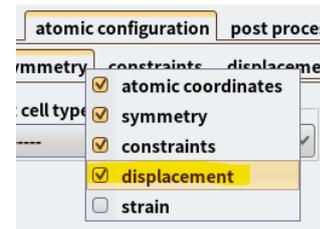
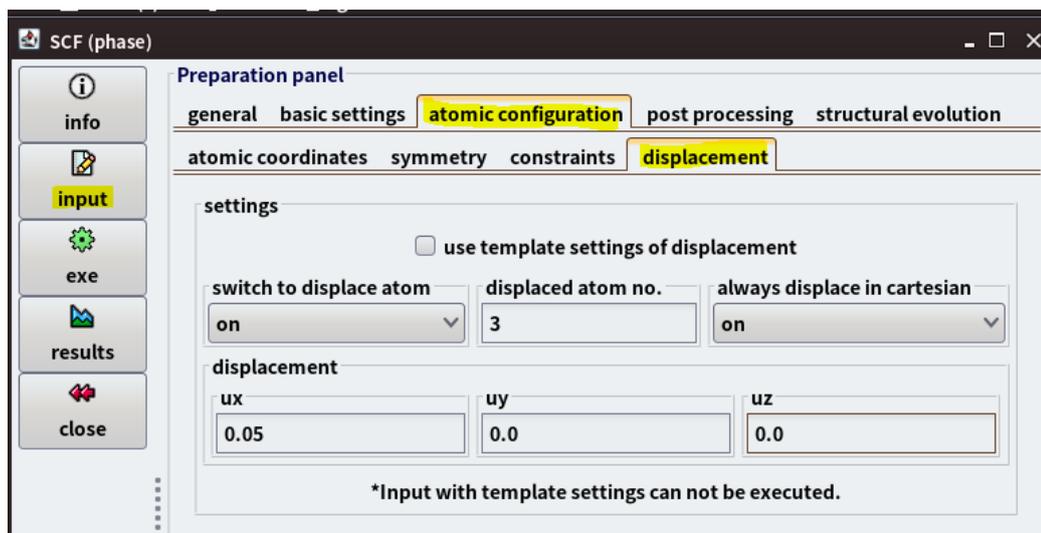
Berry phase計算用のGUIの実装



Berry phase計算に必要な設定:

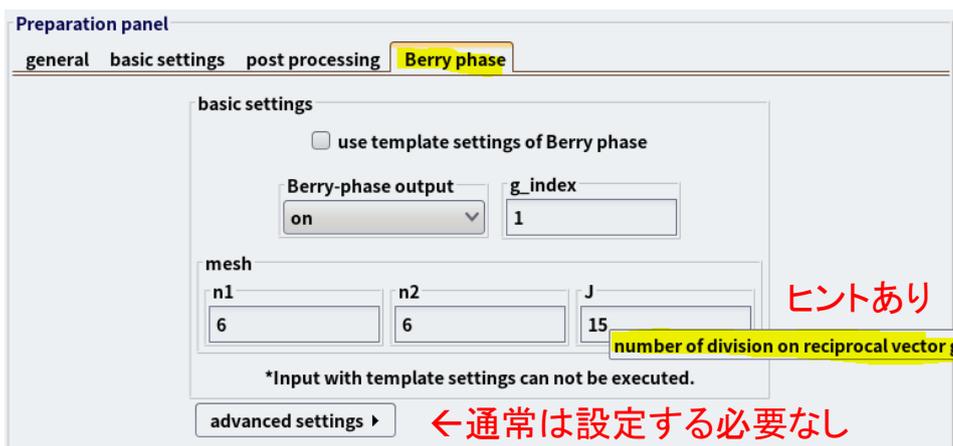
- displacement入力設定
- Berry phase計算パラメータ設定
- Phonon計算関連の入力設定
- 後処理におけるpolarization出力の設定

displacement入力パネルの実装



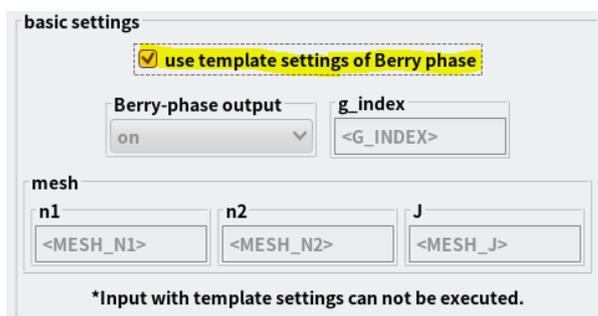
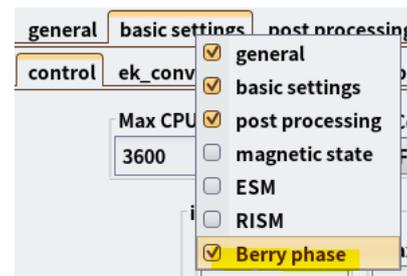
template settingsはワークフロー専用で、そのまま実行できない

Berry phase計算設定パネルの実装



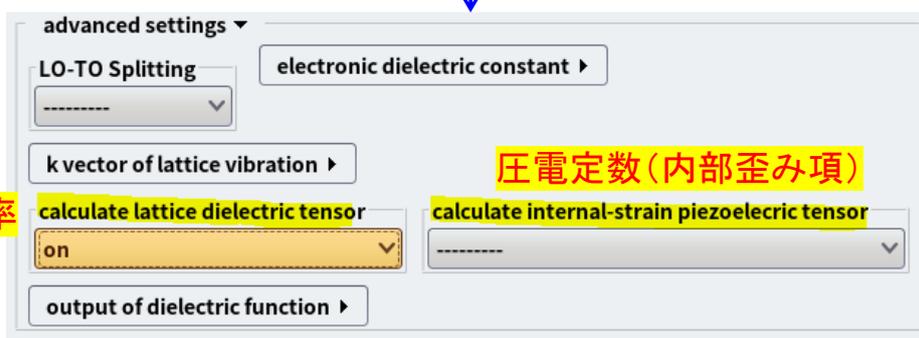
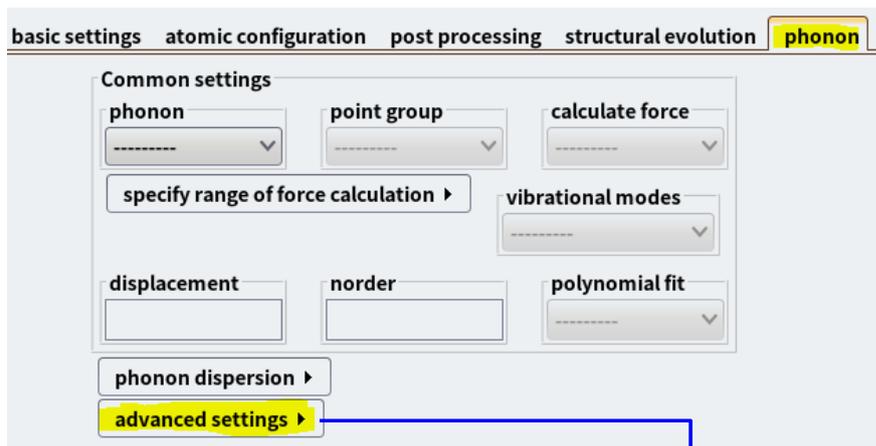
ヒントあり

←通常は設定する必要なし

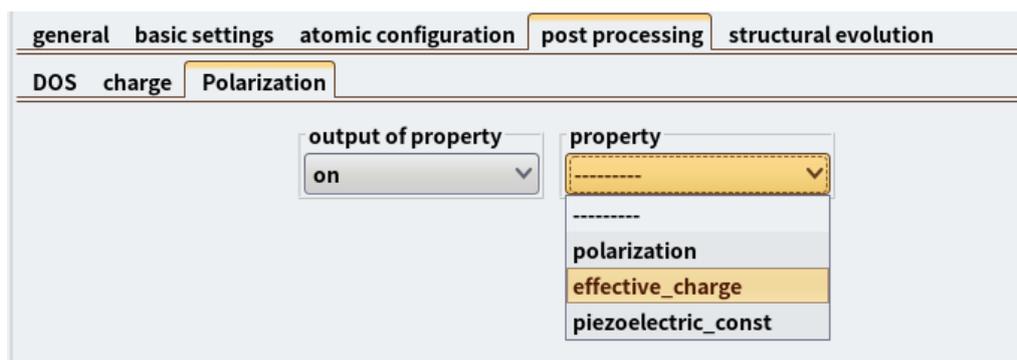


template settingsはワークフロー専用で、そのまま実行できない

Phonon入力設定パネルの追加実装



Polarization設定パネルの実装



Phonon計算における後処理の入力設定

property = **effective_charge**: 有効電荷を出力
 property = **piezoelectric_const**: 圧電定数を出力

ワークフロー計算機能の導入: 背景

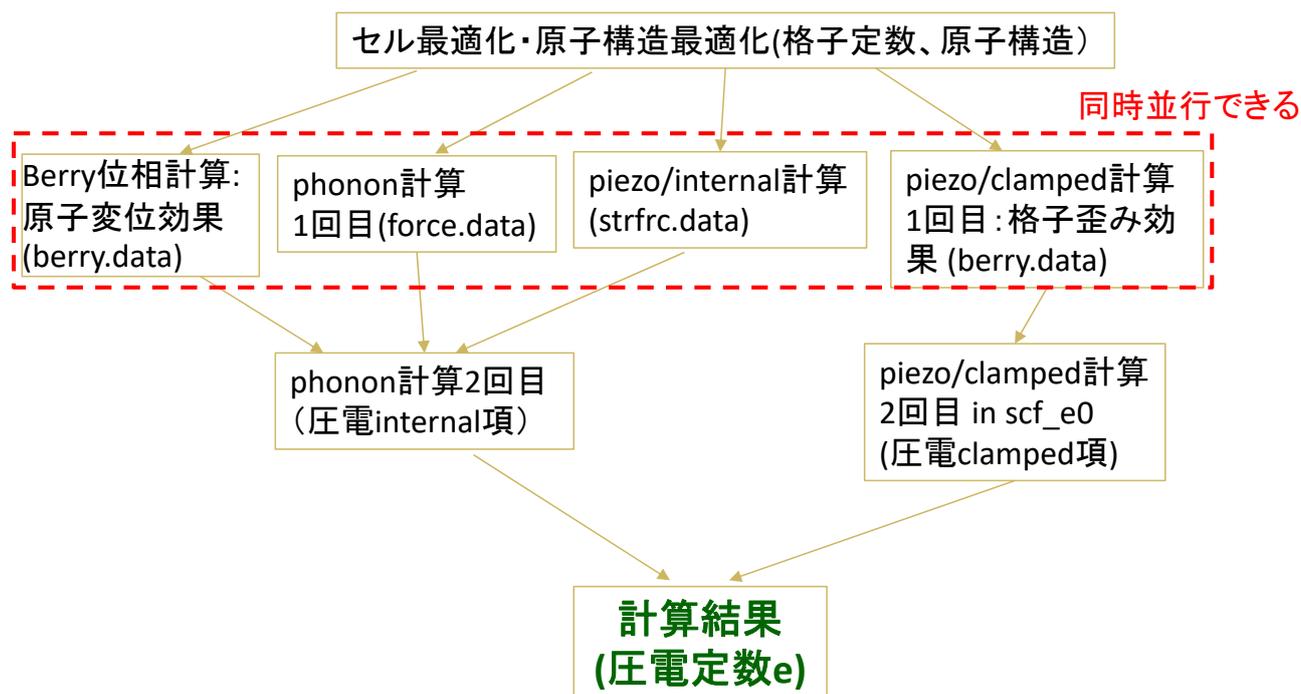
Berry phaseに基づいた下記計算は、一つの物性値を求めるために多数のSCF計算 & non-SCF計算が必要

- ・ボルン有効電荷
- ・格子誘電率
- ・圧電定数



スクリプトを用いて計算を実行するが、インプットファイルの作成自体にも難易度が高い。

圧電定数の計算手順

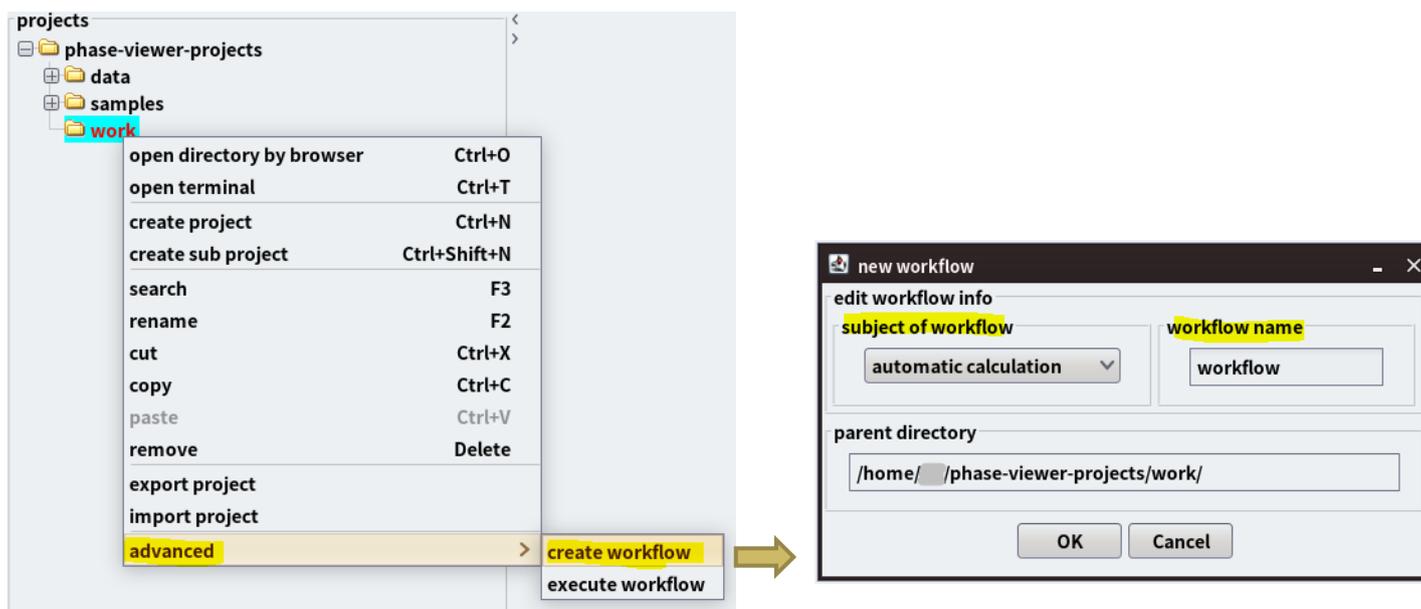


*括弧内のは出力

*赤枠内の計算は同時に実行できる。

*赤枠内の計算を実行した後、その以降の計算は時間かからない。

ワークフロー機能の導入

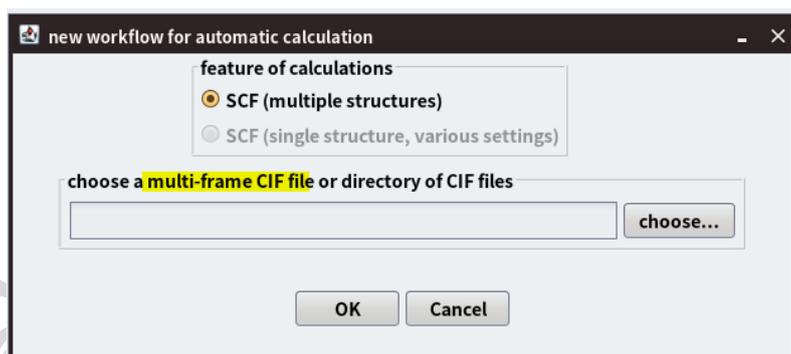
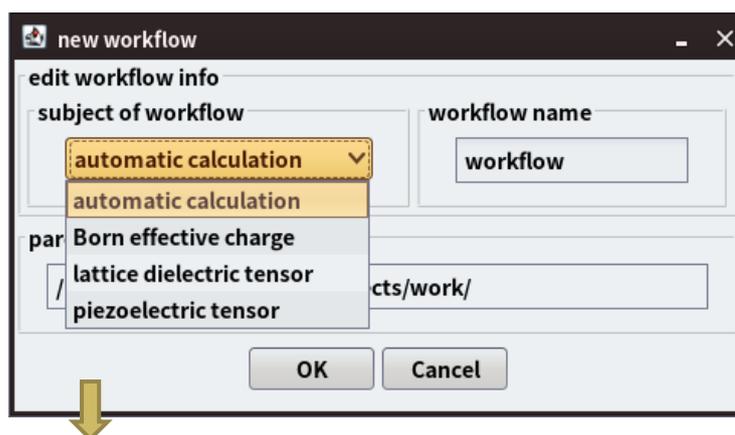


プロジェクトの右クリックメニューにadvancedメニューを追加:

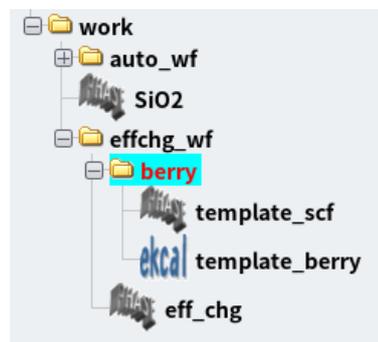
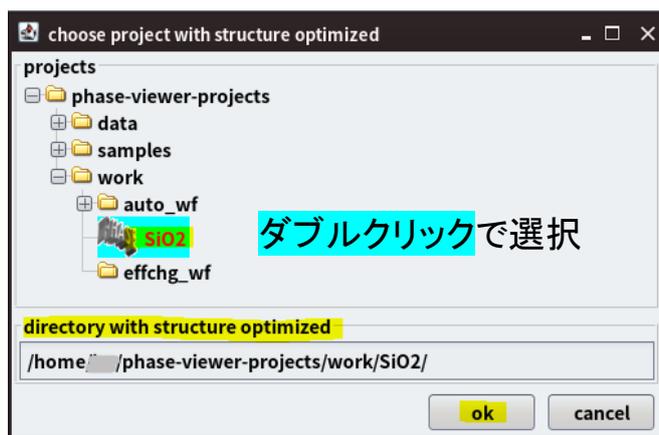
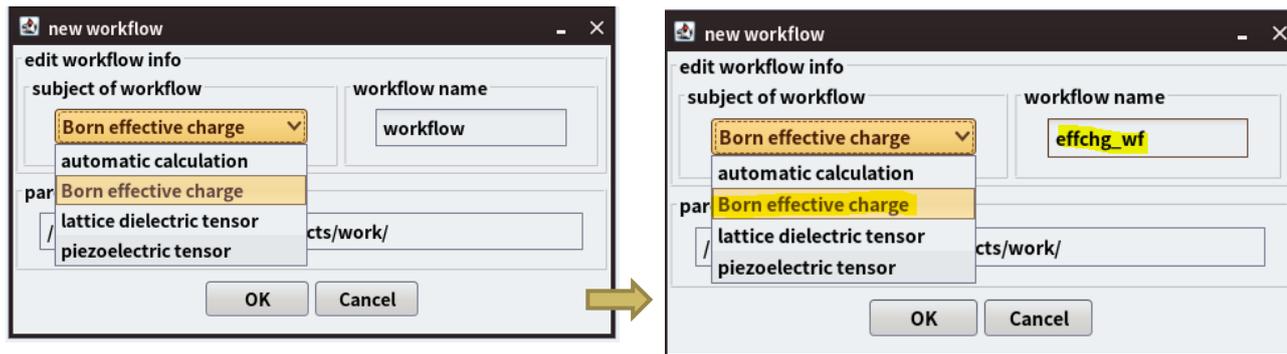
- create workflow
- execute workflow

ワークフローの種類

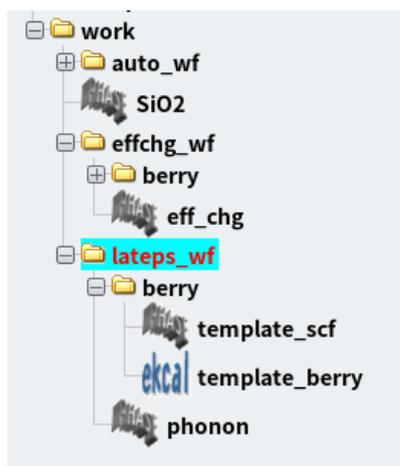
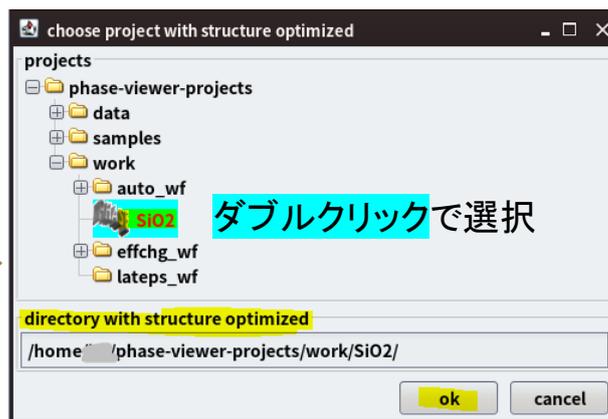
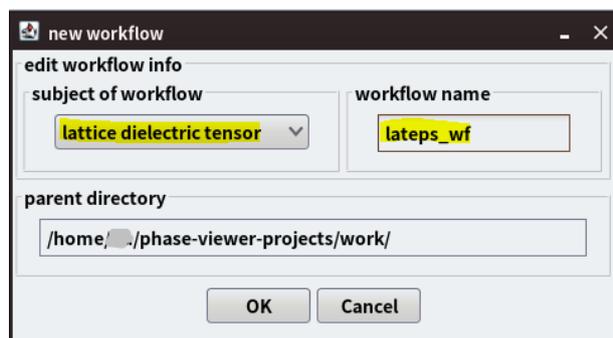
- 自動化計算(連続計算)
- ボルン有効電荷
- 格子誘電率
- 圧電定数



有効電荷計算用のワークフローの作成

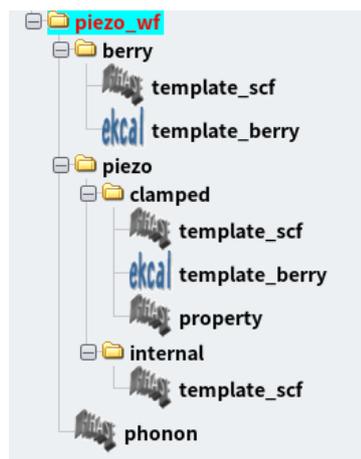
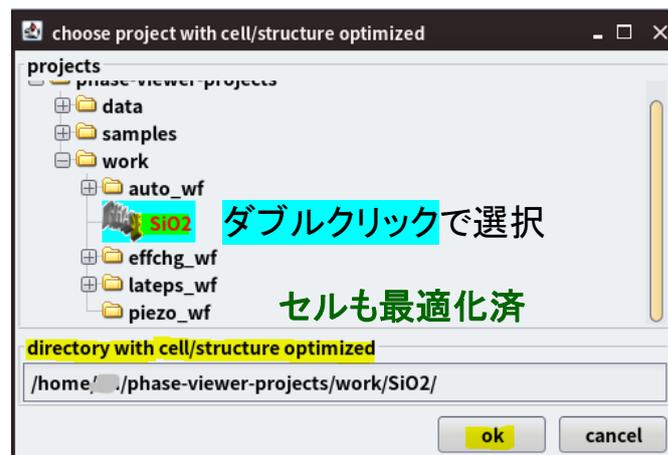
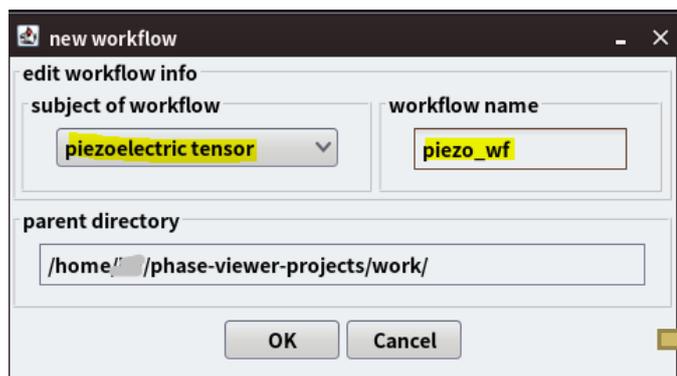


格子誘電率計算用のワークフローの作成



berry計算用のtemplateプロジェクト以外、
phonon計算プロジェクトも生成された

圧電定数計算用のワークフローの作成



圧電定数計算ワークフローの細分化:

workflow.xmlで管理

berry: ベリー位相計算のワークフロー

piezo: 圧電計算専用のワークフロー

clamped: イオン固定項関連計算のワークフロー

internal: 内部歪み項関連計算のワークフロー

phonon: phonon計算(1回目、2回目)のワークフロー

ワークフローに対する処理 (1)

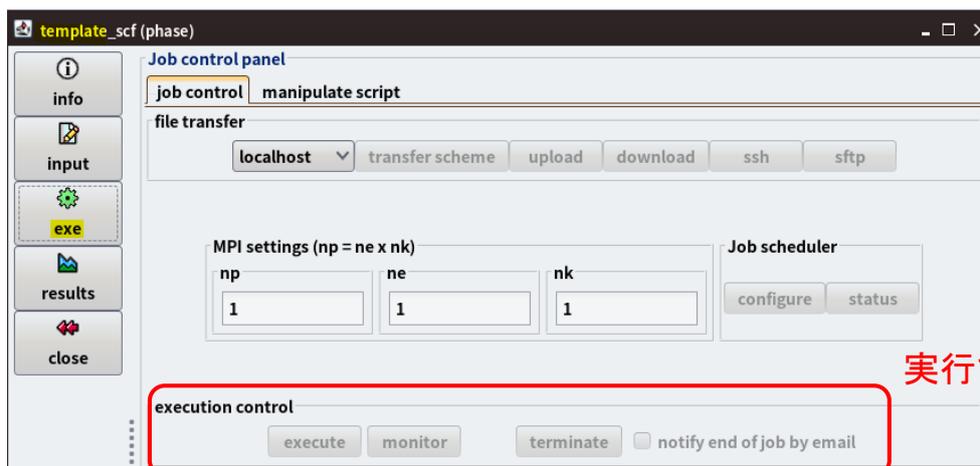
- Terminalでスクリプトを用いて実行、あるいは execute workflowで実行。
execute workflowの機能は現在実装中。

スクリプトの実行例 (Windows & Linux):

```
perl -S prep_piezo.pl 0.01 "1 3 5" "6 6 15" "6 6 15" "6 6 15"
```

```
perl -S prep_strfrc.pl 0.01 "1 3 5"
```

- Templateプロジェクトは実行できないという制限を加えている。



ワークフローに対する処理 (2)

- ・計算ディレクトリはプロジェクト管理 (一括import, restoreを含む) から除外。

```

berry_a0_g1    berry_a1_u2_g1    berry_a2_u1_g1    berry_a2_u3_g1    P06.sh.e850    scf_a2_u1
berry_a0_g2    berry_a1_u2_g2    berry_a2_u1_g2    berry_a2_u3_g2    P06.sh.o850    scf_a2_u2
berry_a0_g3    berry_a1_u2_g3    berry_a2_u1_g3    berry_a2_u3_g3    scf_a0          scf_a2_u3
berry_a1_u1_g1  berry_a1_u3_g1    berry_a2_u2_g1    berry.data        scf_a1_u1      template_berry
berry_a1_u1_g2  berry_a1_u3_g2    berry_a2_u2_g2    exec_zeff.pl      scf_a1_u2      template_scf
berry_a1_u1_g3  berry_a1_u3_g3    berry_a2_u2_g3    P06.sh           scf_a1_u3
  
```

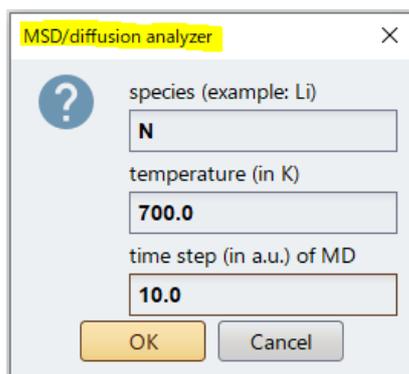
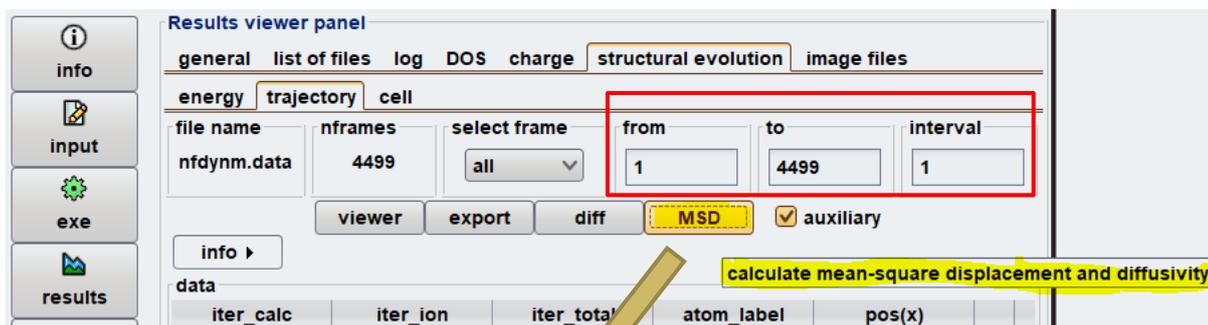
- ・変位原子の数が多くなると、計算ディレクトリがかなり増えます。
- ・Berry phaseの計算は“directory並列”であり、並列化効率が非常に高い。

作成したワークフローの動作確認

AINの圧電定数 (C/m²)

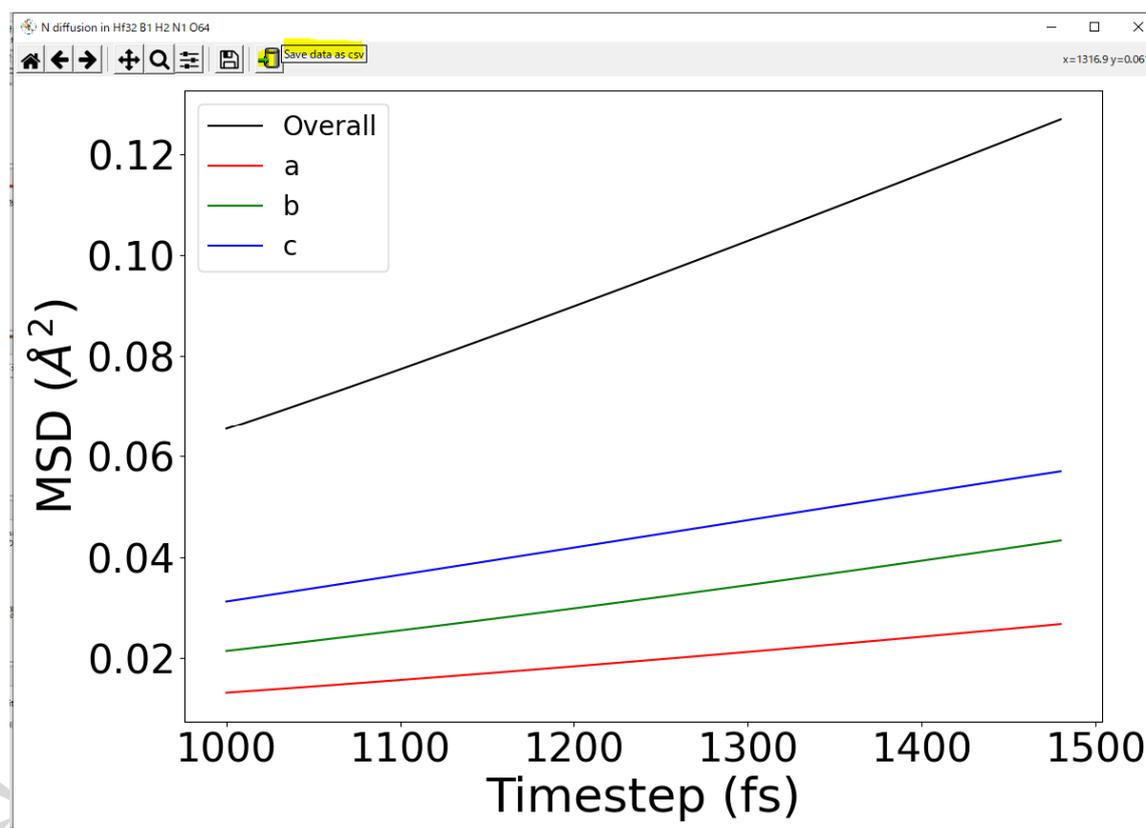
成分	イオン固定項	内部ひずみ項	合計	実験値
e_{31}	0.251	-0.906	-0.655	-0.58
e_{33}	-0.398	2.004	1.606	1.55
e_{15}	0.332	-0.675	-0.343	-0.48

第一原理MDシミュレーション結果に基づいたMSDと拡散係数の計算



- ・MSDボタンはMD計算の場合のみ、有効になる
- ・trajectoryの間引きは from, to, interval で設定可能
- ・必要な手動入力は拡散の原子種のみ (温度、MD計算の時間ステップはインプットから読み取る)

MSDの計算例



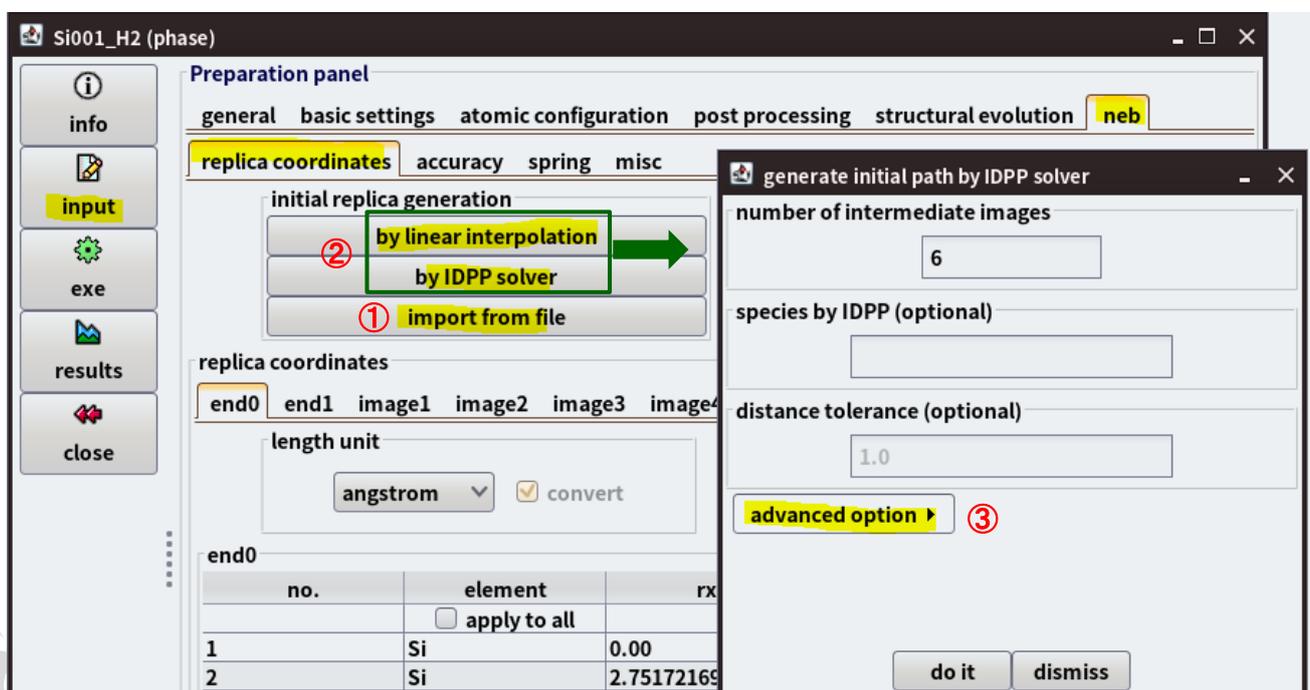
拡散係数の出力結果

```

D: diffusivity in cm^2/s, sigma: standard deviation, S: conductivity in mS/cm
D : 2.1355860147891495e-06
D_sigma : 1.850257465919071e-10
D_charge : 2.1355860147891495e-06
D_charge_sigma : 1.850257465919071e-10
S : 0.0
S_sigma : 0.0
S_charge : 0.0
D_components : [1.418229687839292e-06, 2.283260588520558e-06, 2.7052677680076056e-06]
S_components : [0.0, 0.0, 0.0]
D_components_sigma : [2.087445142583931e-10, 3.203184711615014e-10, 4.1771163778472173e-11]
S_components_sigma : [0.0, 0.0, 0.0]
specie : N
step_skip : 1
time_step : 10.0
temperature : 700.0
max_framework_displacement : 3.96115595398676
Haven_ratio : 1.0
  
```

NEB計算途中のイメージ編集機能

NEB計算が収束しない場合、途中の反応パスをインポートし、一部のイメージを編集することで収束性を大幅に向上することが可能。



The screenshot shows the 'Preparation panel' for a NEB calculation. The 'neb' tab is selected, and the 'import from file' option is highlighted with a red circle and arrow (1). The 'by linear interpolation' option is highlighted with a green box and arrow (2). A dialog box titled 'generate initial path by IDPP solver' is open, showing the 'number of intermediate images' set to 6, and an 'advanced option' button highlighted with a red circle and arrow (3).

Preparation panel

general basic settings atomic configuration post processing structural evolution **neb**

replica coordinates accuracy spring misc

initial replica generation

② by linear interpolation →

by IDPP solver

① import from file

replica coordinates

end0 end1 image1 image2 image3 image4

length unit

angstrom convert

end0

no.	element	rx
1	Si	0.00
2	Si	2.75172169

generate initial path by IDPP solver

number of intermediate images

6

species by IDPP (optional)

distance tolerance (optional)

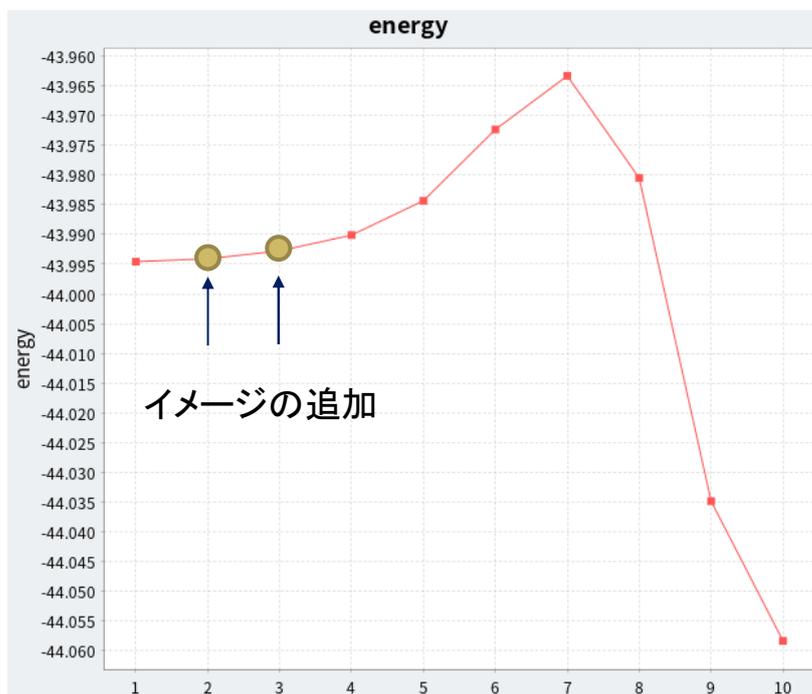
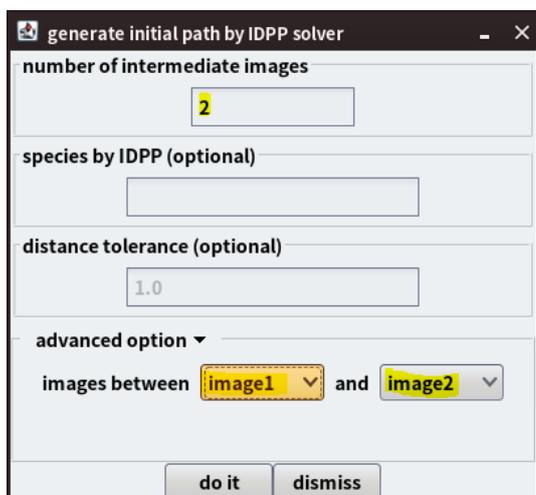
1.0

advanced option ▶ ③

do it dismiss

一部イメージの追加・再生成・削除

任意のイメージの間に中間イメージの追加・再生成あるいは削除が可能

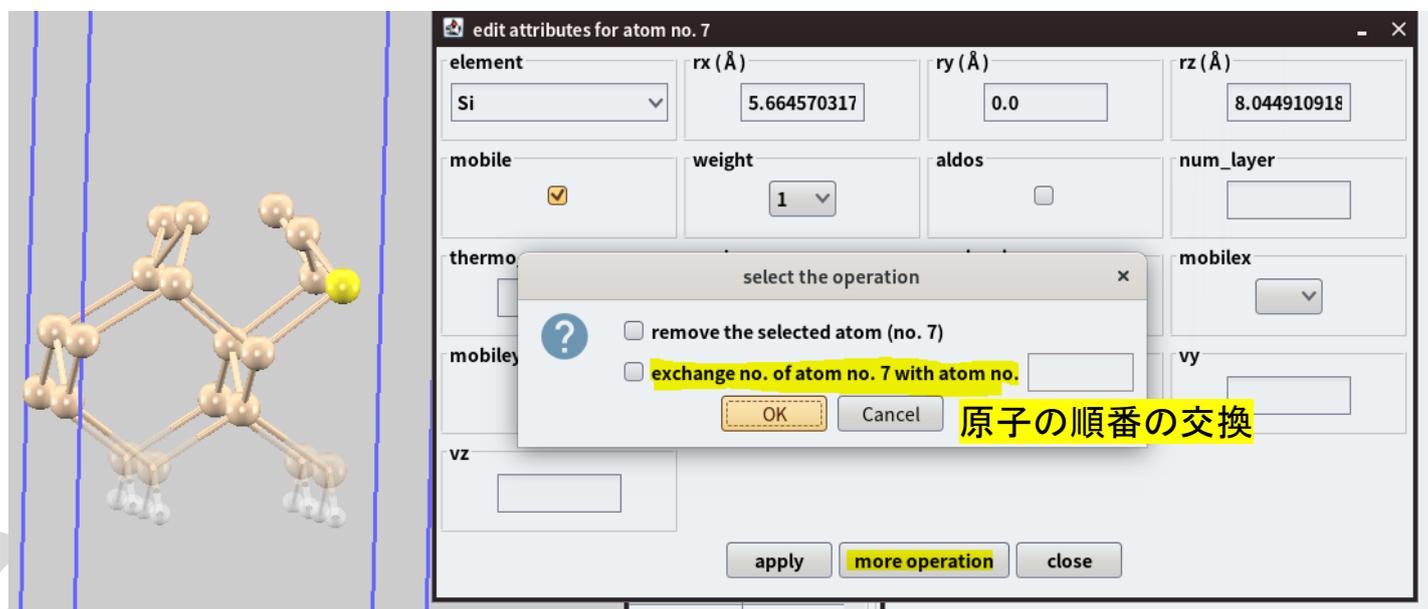


原子編集機能の追加

- 原子の順番(no.)の編集機能

NEB計算など

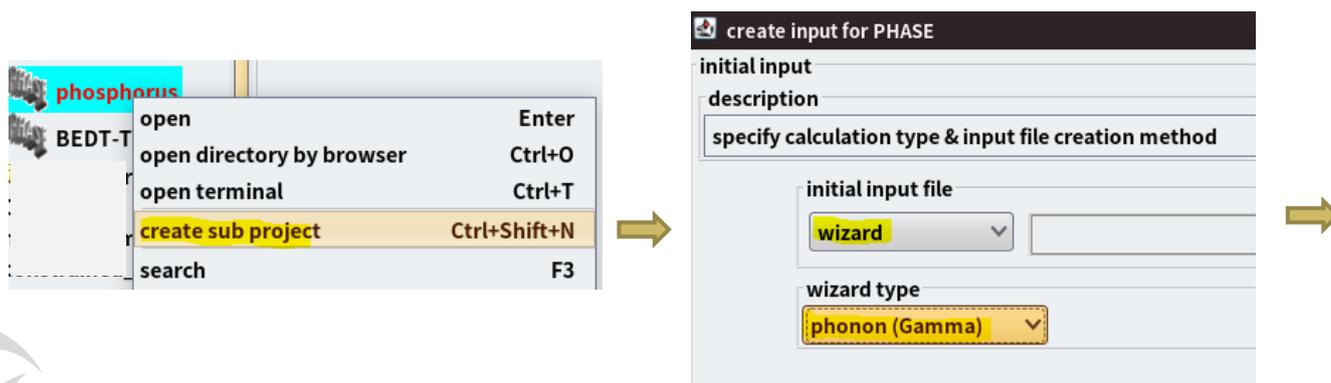
単独なDFT計算には原子の順番を意識しなくても良い。ただし、始状態・終状態のような複数の計算から結果を求める場合、原子の順番を揃える必要がある。



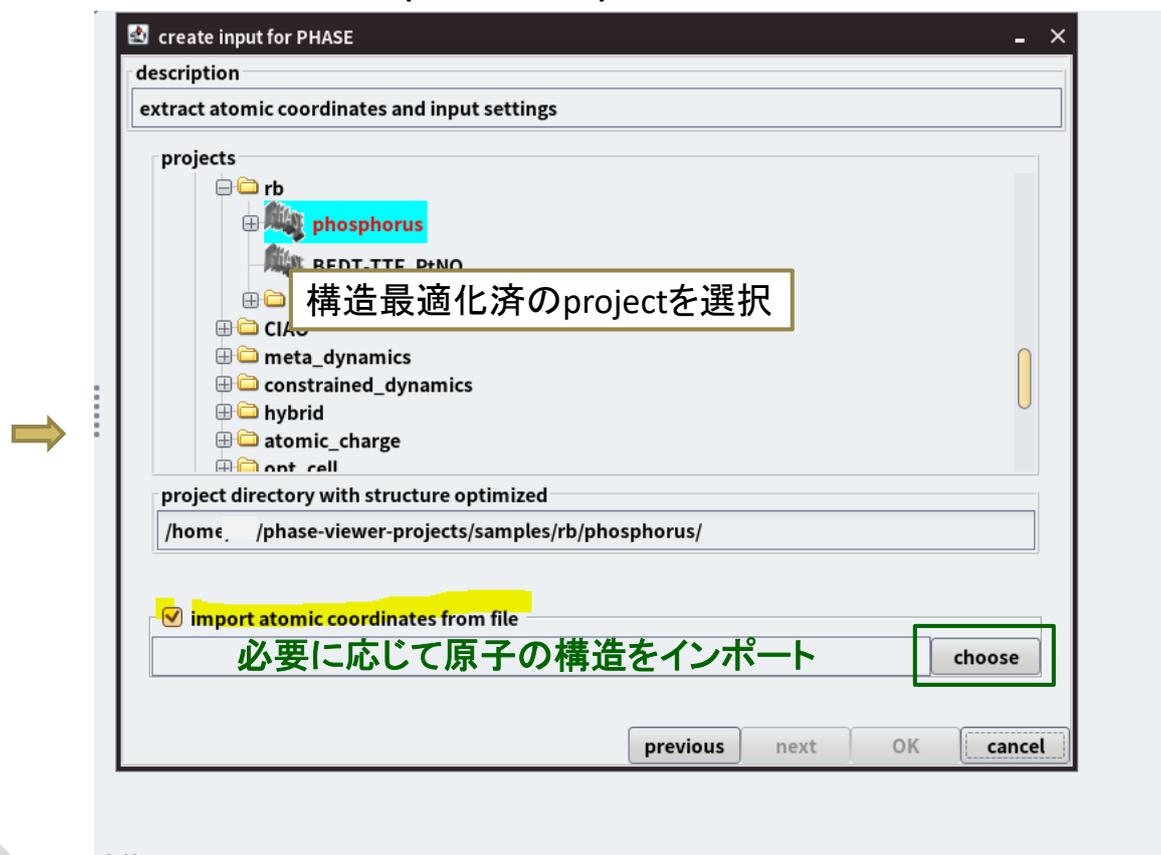
Phonon計算プロジェクトの生成wizardの改修

- Phonon計算は、既存の構造最適化計算(NEB計算を含む)に基づいているので、既存の計算と同じ計算条件で実行する必要がある。

→ (擬ポテンシャルファイルを含む)すべての計算条件を既存の計算プロジェクトから読み込む



Phonon (Gamma) wizardの画面



INFO -

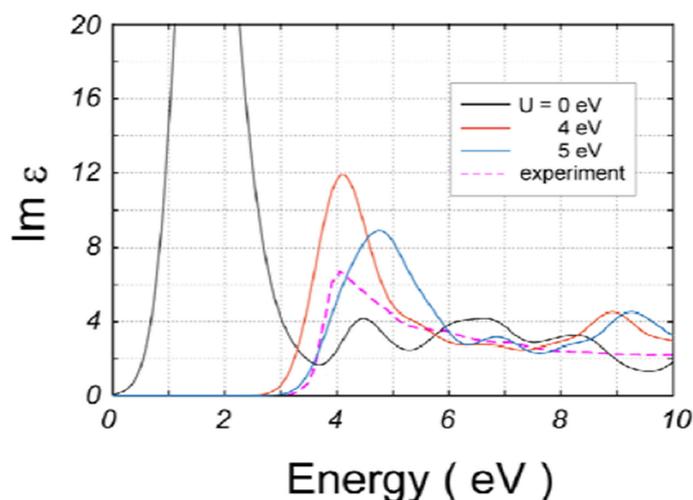
INFO - import atomic coordinates from file: this operation is only necessary for cases like transition-state structures

INFO - The input settings will be extracted from the project directory with structure optimized

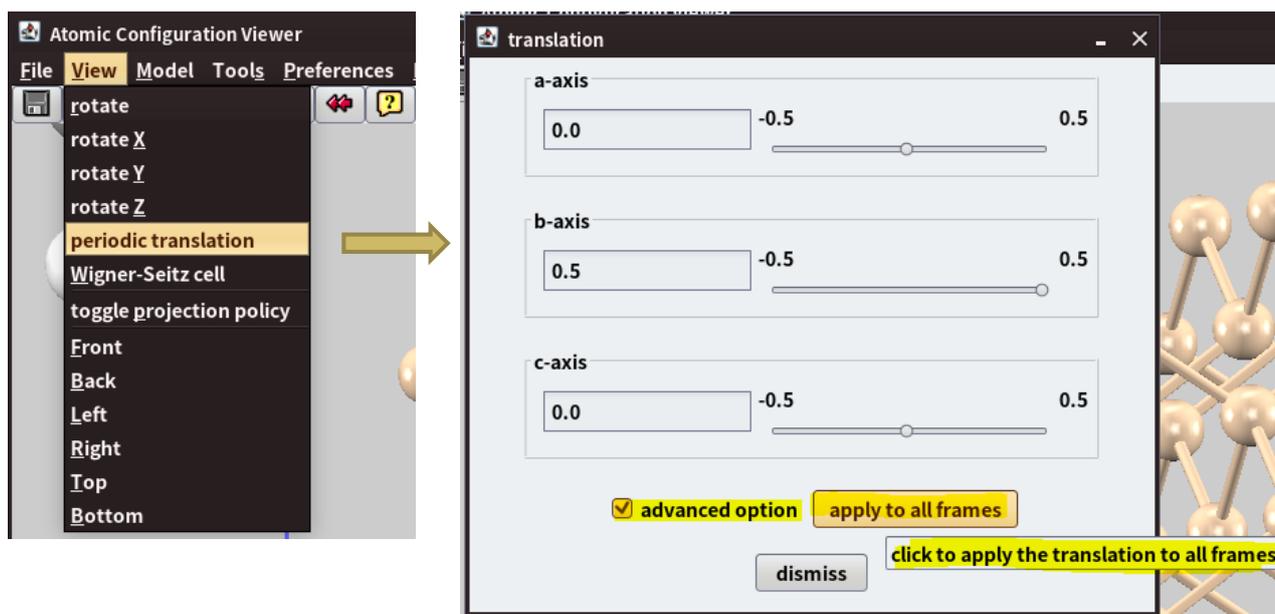
SCF計算からdos/band/誘電率計算プロジェクト作成時の原子属性の継承

- DFT+U計算: dos/band/誘電率計算プロジェクトを作成する時に**パラメーターU**に関する手動設定が不要

動作確認: NiOの電子誘電率虚部の実験との比較



Periodic translation: all frameへの適用



Trajectoryの可視化などに活用できる。

Trajectoryの可視化における原子属性の利用

- 原子属性を利用してtrajectoryを可視化することが可能。

iter_calc	iter_ion	iter_total	atom_label	pos(x)	pos(y)	pos(z)
1	1	20	1	0.010445204	0.000000000	0.010445200
1	1	20	2	0.010445204	0.000000000	0.010445200
1	1	20	3	0.010445204	0.000000000	0.010445200
1	1	20	4	0.010445204	0.000000000	0.010445200
1	1	20	5	0.010445204	0.000000000	0.010445200
1	1	20	6	0.010445204	0.000000000	0.010445200
1	1	20	7	0.010445204	0.000000000	0.010445200
1	1	20	8	0.010445204	0.000000000	0.010445200
1	1	20	9	0.010445204	0.000000000	0.010445200
1	1	20	10	0.010445204	0.000000000	0.010445200

原子の可動属性の表示
(固定原子を透明化)

(例) Trajectoryの可視化における原子の分子属性の利用

NEB入力設定:一部原子層固定時の可視化

Preparation panel

general basic settings atomic configuration post processing structural evolution **neb**

replica coordinates accuracy spring misc

initial replica generation replica manipulation

by linear interpolation **view/edit reaction path**

by IDPP solver distance from end0

import from file export to file

replica coordinates

end0 end1 image1 image2 image3 image4 image5 image6 image7 image8 ima...

length unit angstrom convert energy 39603667E+03 Hartree

Atomic Configuration Viewer

ry	rz
07751038	0.00
07751038	0.00
07751038	0.00
84636413	2.3384750022
20684015	2.3439482844
84729577	0.228884464

frames

number of frames: 12

skip 1 specify frame no. 8

frame rate 0 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100

NEB結果解析:一部原子層固定時の可視化

Results viewer panel

list of files log DOS charge structural evolution image files **NEB energy & trajectories**

extract mode replica ID 2 extract

energy & force **trajectories**

file name nfdynm.data.rep2 nframes 8 select frame all viewer export diff

Atomic Configuration Viewer

frames

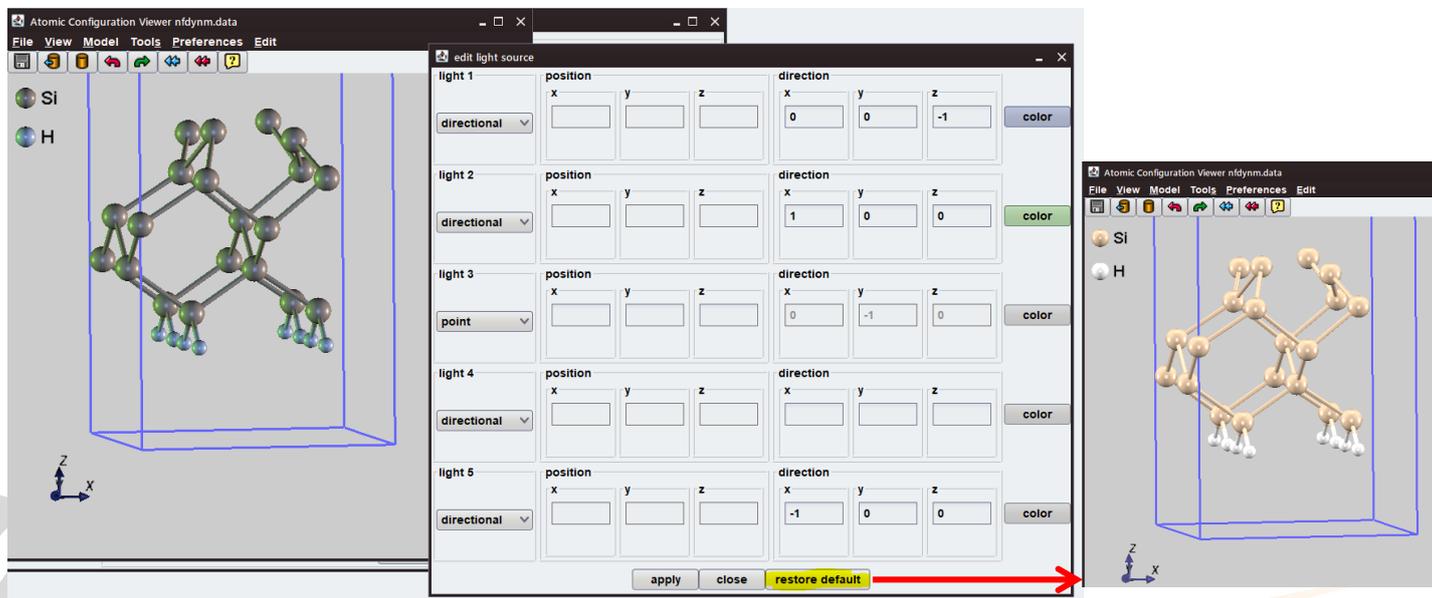
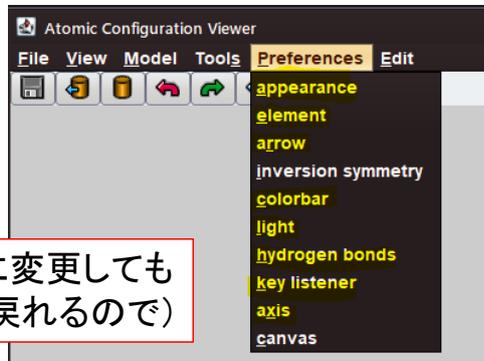
number of frames: 8

skip 1 specify frame no. 1

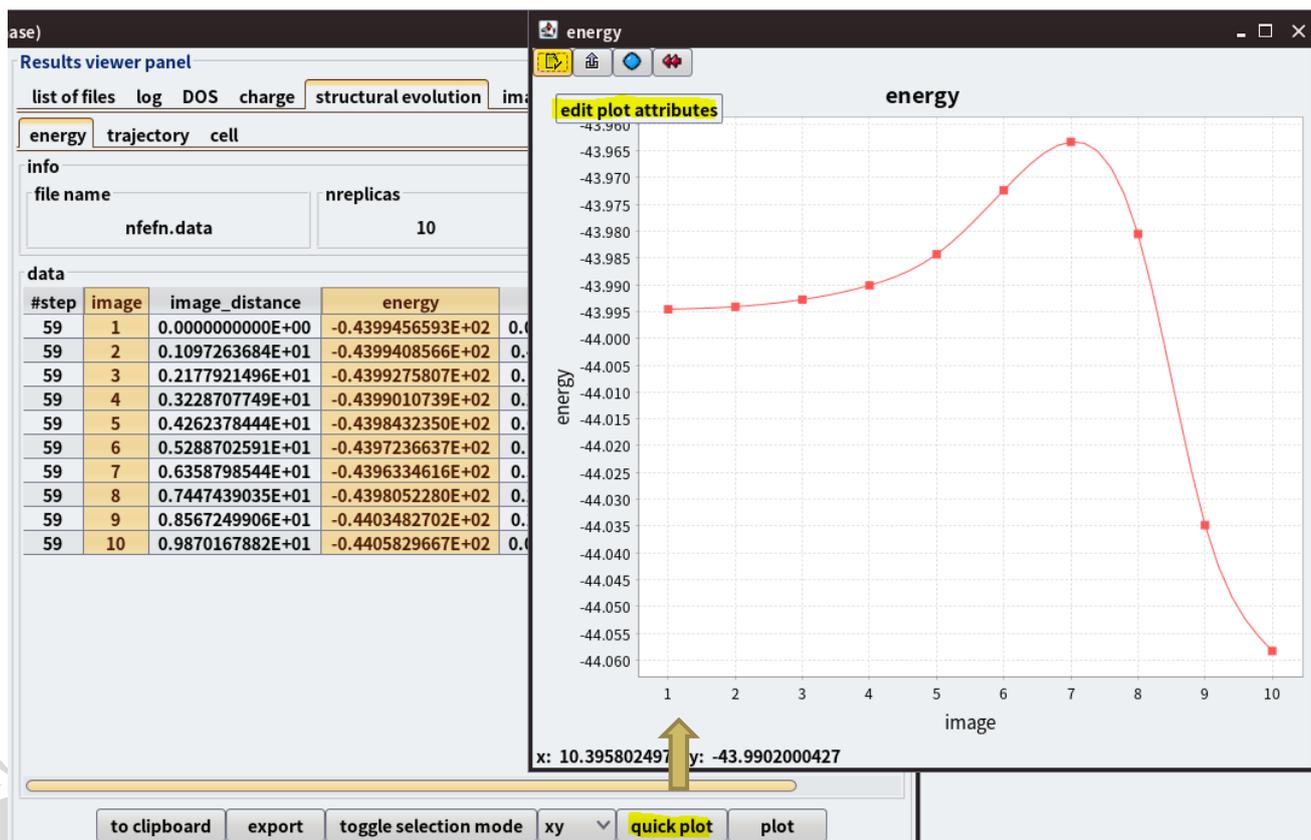
frame rate 0 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100

原子配置ビューアー: Preferences各設定に restore default機能の導入

Preferences各設定を適当に変更しても
心配なし(簡単にdefaultに戻れるので)



quick plot: spline描画機能の追加



RedHat Linux 9への対応

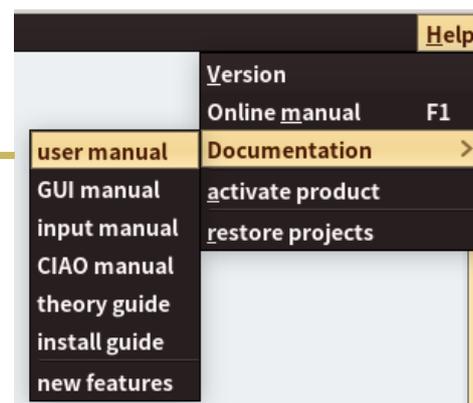
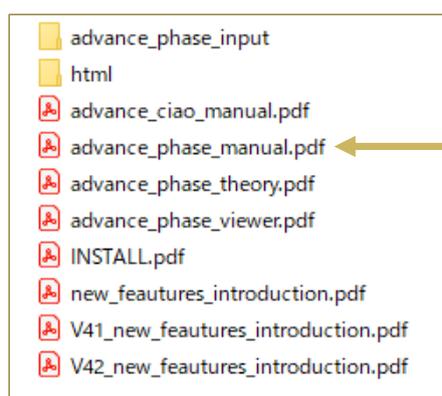
- **Java のアップグレード**: Java 11 → Java 17
Ver.4.2はRedHat Linux 9で複数の動作問題が見られた
→ PHASE同梱のJavaのバージョンアップによって問題を解消した。正常動作確認済。
- **Linux版gnuplotの同梱**:
RedHat Linux 9のパッケージにgnuplotが削除された。
→コンパイル済のLinux版gnuplotをPHASEに同梱し、そのまま利用できる。

Help: Documentationメニューの追加

- OSに依存しない

Windows:
PHASE¥doc

Linux:
PHASE/doc



第1章 はじめに	19
1.1 本マニュアルの構成	19
1.2 Advance/PHASE のディレクトリー構成	19
1.3 注意点	20
第2章 設定方法	21
2.1 実行時ライセンス	21

使い勝手の向上

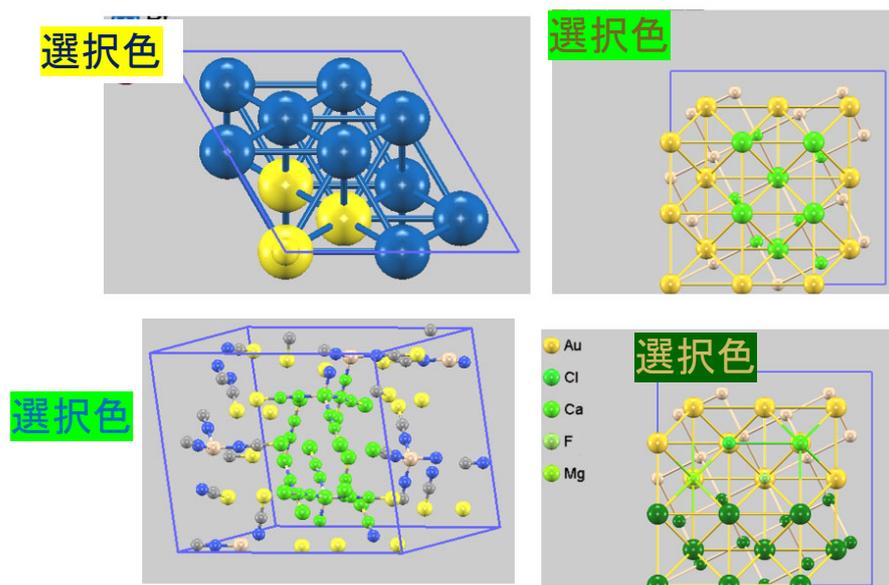
- **phononモード表示の改善**: 自然順 (1, 2, 3, ..., 10, 11, ...) で並べる
- **Windows: cmd terminalの使い勝手の向上**

```
C:\Windows\System32\cmd.exe
(base) C:\Users\%user%\AppData\Local\phase-viewer-projects\samples\basic\zinc-blend\ZnTe\SCF\uvSOR-epsilon-project
> _
```

ディレクトリー名を表示した後、一番左から入力できる

- **project treeの表示の改善**
インポート操作後、自動展開してimported projectを表示

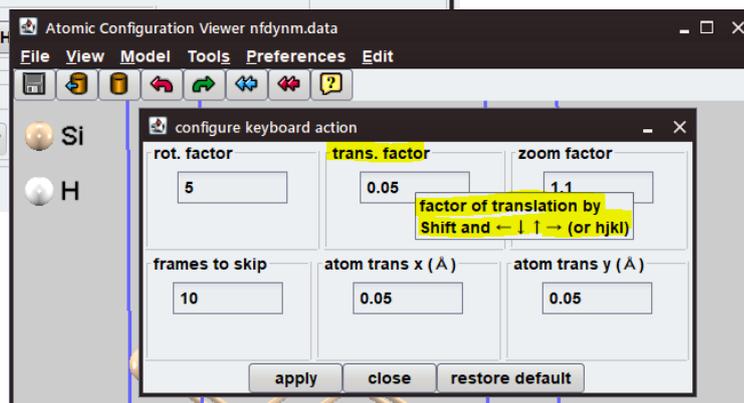
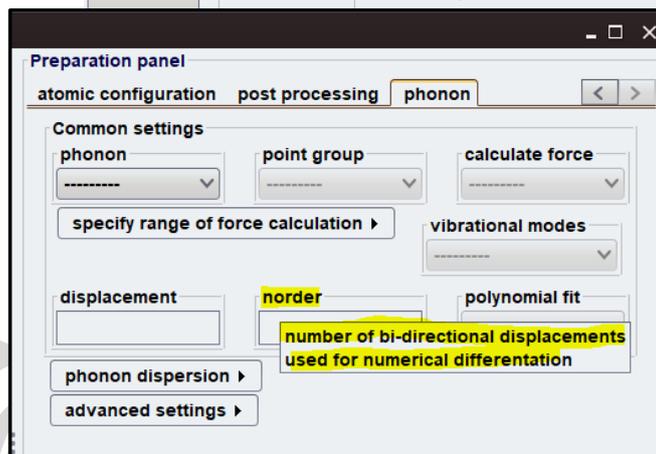
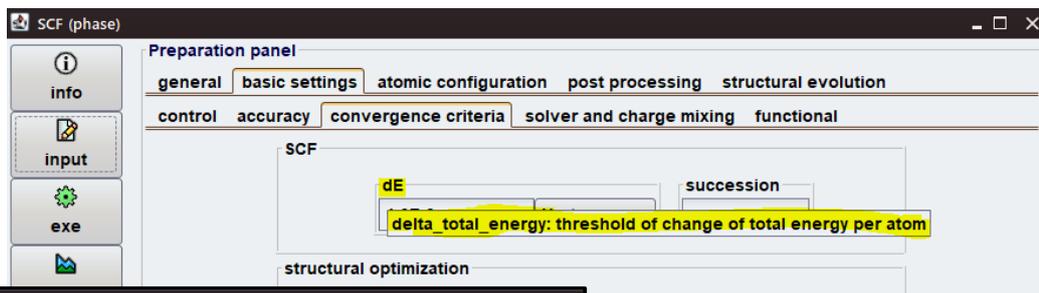
原子選択色の自動設定



選択色の手動設定も可能(従来通り)

• ヒントの追加(多数)

略語を使用したGUIコンポーネント、あるいは分かりにくい項目に対してヒントを追加した
(マウスを該当項目に置いてしばらく経つとヒントが出る)



第三者ソフトとの連携

Open catalyst project (OCP)

<https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp>

- Facebook AI Researchとカーネギーメロン大学が主催。
- OC20: 教師データはほとんど金属(合金を含む)表面と吸着分子のDFT計算結果。酸化物は含まれていない。
(250 million single point calculations)
- OC22: 酸化物を対象とした。ただし、教師データはまだ限定的になっている。
(9.8 million single point calculations)
- OCPは学習済のモデルを公開している。特徴は、吸着構造に対して energyとforceを予測できる。

OCPのpretrained modelを用いた構造最適化

S2EF models

Model	Training	Download	val ID force MAE	val ID energy MAE
GemNet-dT	OC22	checkpoint config	0.032	1.127
GemNet-OC	OC22	checkpoint config	0.030	0.563
GemNet-OC	OC20+OC22	checkpoint config	0.027	0.483
GemNet-OC	OC20->OC22	checkpoint config	0.030	0.417

対象: 金属表面上の吸着分子構造
(一部の原子層を固定)

力の計算: S2EF model (GemNet-OC)
アルゴリズム: BFGS

	Step	Time	Energy	fmax
BFGS:	0	10:54:33	-140.388885	1.6397
BFGS:	1	10:54:33	-140.426025	0.6841
BFGS:	2	10:54:33	-140.432785	0.7407
BFGS:	3	10:54:34	-140.451141	0.7826
BFGS:	4	10:54:34	-140.489502	0.4412
BFGS:	5	10:54:34	-140.489822	0.4674
BFGS:	6	10:54:35	-140.511902	0.5261
....
BFGS:	28	10:54:43	-140.713821	0.0796
BFGS:	29	10:54:43	-140.699646	0.0748
BFGS:	30	10:54:43	-140.692795	0.0852
BFGS:	31	10:54:44	-140.707672	0.0942
BFGS:	32	10:54:44	-140.721573	0.1411
BFGS:	33	10:54:44	-140.740616	0.0572
BFGS:	34	10:54:44	-140.729187	0.2607
BFGS:	35	10:54:45	-140.735016	0.0933
BFGS:	36	10:54:45	-140.735916	0.0310

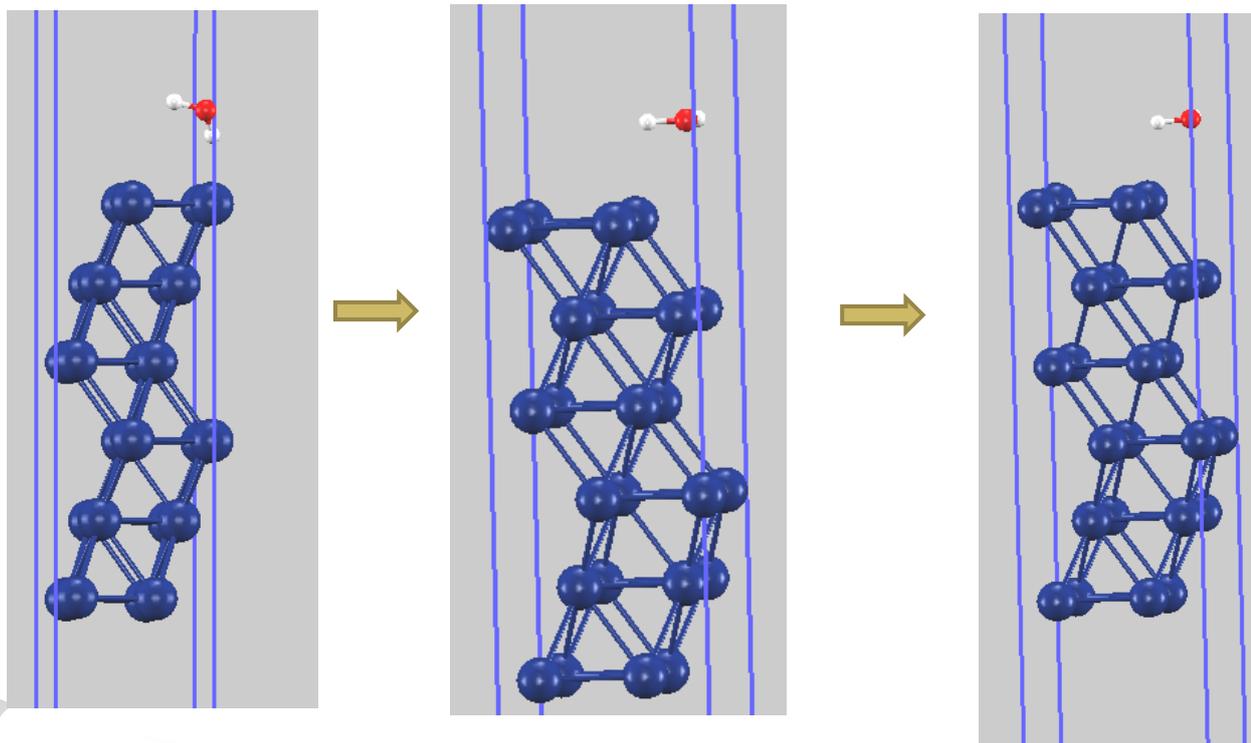
百原子程度の系は12秒で収束した

OCPモデルで最適化した構造の例

初期構造

OCPモデルで最適化した構造

DFT計算



OCPモデルとの連携による構造最適化の加速

前例では、

- DFTで初期構造から最適化：
220回 ionic step
- OCPモデルで最適化した構造からDFTで最適化：
99回 ionic step、時間は約 1/2程度に短縮

* 他の例では加速の効果にばらつきがある。

例えば 233回 ionic step から 201回 ionic stepに短縮する例もある

OCPモデル・使用スクリプトの同梱

- OC22 pretrained modelや使用スクリプトを Advance/PHASE ver.4.3に同梱する予定
*GUIでの対応は可能だが、応用範囲の限定が必要で、対応は検討中)
- OCPのパッケージは4GB弱なので、install DVDには同梱しない方向。
- ユーザー様のほうでofflineで導入する必要な場合、サポートセンターからパッケージを提供する。

ご清聴ありがとうございました。

お気軽にお問い合わせください。



酸化チタンへの不純物ドーピングが次世代蓄電池負極特性に与える効果とその解析事例について

Effect of Impurity Doping on TiO_2 on Anode Properties of The Next-Generation Rechargeable Batteries and Examples of Its Analysis Results

鳥取大学 工学部 化学バイオ系学科
薄井洋行

1

定置用蓄電池の世界市場規模の予測

Confidential

出典: 矢野経済研究所『定置用蓄電池市場の現状と将来展望』
<https://project.nikkeibp.co.jp/ms/atcl/19/news/00001/00201/?ST=msb>



今後の予想

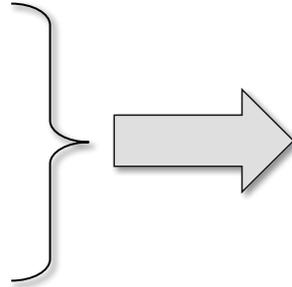
生産・市場規模が急速に増大し、電力系統用が大きな割合を占める

2

	主な用途	求められる性能			
かつては...	 携帯機器 スマートフォン タブレット デジタルカメラ ノートPC ...	高容量			
近年	 自動車	低電圧系ハイブリッド	鉛互換	高出力	長寿命
		高電圧系ハイブリッド	高出力	長寿命	高安全 <small>三菱自動車 i-MiEV</small>
		PHV (Plug-in Hybrid Vehicle)	高容量	長寿命	高安全性
		EV (Electric Vehicle)	高容量	高安全性	長寿命

最近の蓄電池に求められる性能:

- 高安全性
- 高出力
- 長寿命



正極: LiMn_2O_4
 負極: $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$

<https://www.toshiba-clip.com/detail/p=1857>

$\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ に替わる負極材の候補：ルチル型 TiO_2

	$\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$	Rutile TiO_2	
主な製法	固相反応法	硫酸法	
取引価格 (1 kgあたり)	約1万円	約1000円	圧倒的に低いコスト
充放電電位 / V vs. Li/Li ⁺	1.55-1.60	1.1-1.5	高い安全性
密度 / g cm ⁻³	3.48	4.23	優れたLi ⁺ 拡散能
Li ⁺ 拡散係数 / cm ² s ⁻¹	10 ⁻¹⁵ -10 ⁻¹¹	10 ⁻⁶ (c軸方向), 10 ⁻¹⁴ (ab面内方向)	ab面内方向にはLi ⁺ が拡散しにくい
電子伝導性 / S cm ⁻¹	10 ⁻¹³	10 ⁻¹³	低い電子伝導性
理論容量 / mA h g ⁻¹	175	335	
Li吸蔵時の 体積膨張率	0.2%	16%	



三菱自動車 i-MiEV

鳥取大学の
発明材料

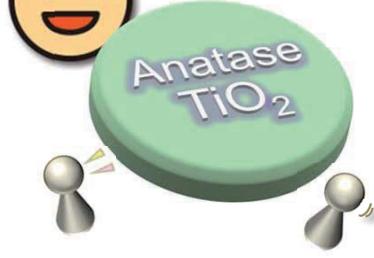


独自のアイデアと
工夫で課題を克服

ルチル型TiO₂の研究の意義



- 高い安全性
- 優れた耐久性



- 低いコスト
- 良好な耐久性

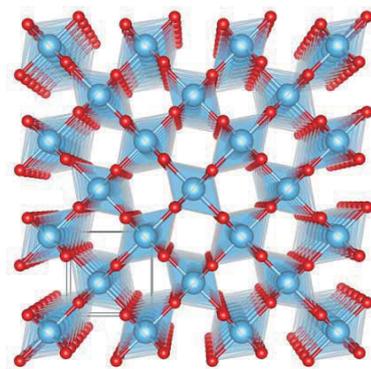
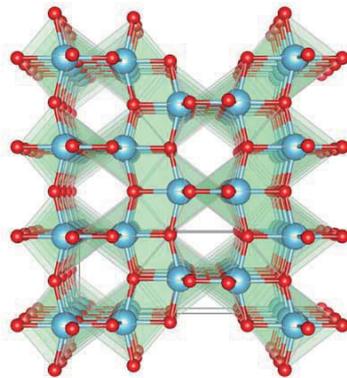
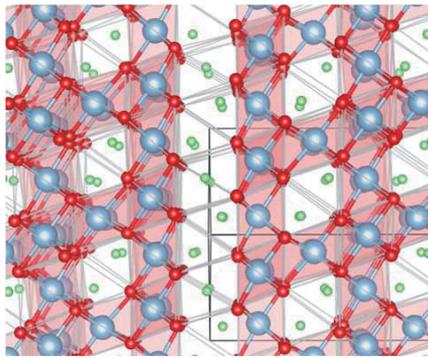


研究例は皆無...

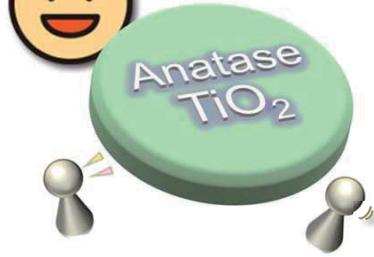


- 高いLi⁺拡散能
- △異方的なイオン拡散

多くの研究者らが注目



ルチル型TiO₂の研究の意義



研究例は皆無...



- 高いLi⁺拡散能
- △異方的なイオン拡散

不純物のドーピング

単結晶化

粒子形状の制御

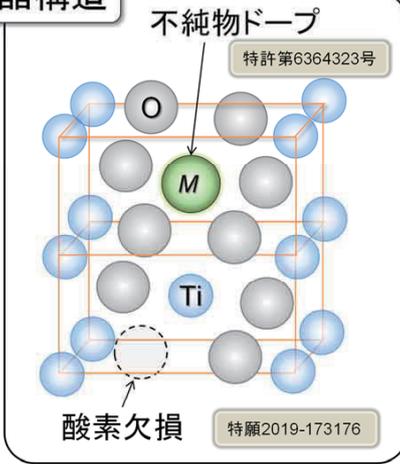


◎潜在的な高性能を開花

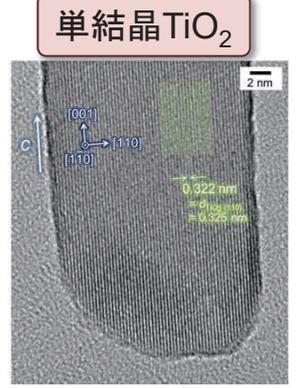
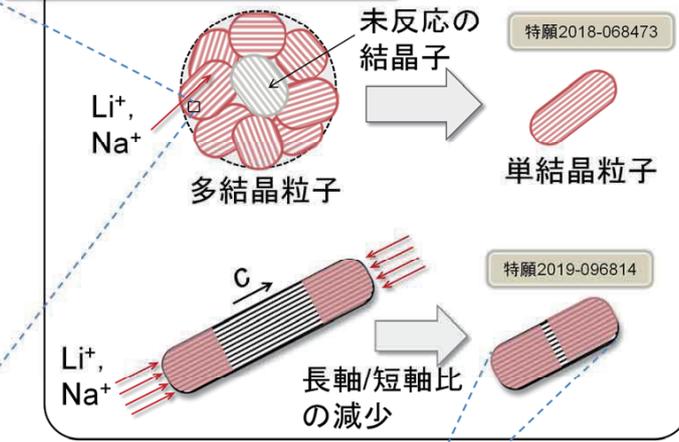
対象の欠点だけでなく、潜在的な長所にも目を向け、創意工夫でそれを伸ばす理念は、地方大学における学生の教育に通じるものがある。

研究の特徴：ルチル型TiO₂の性能を引き出す方法論

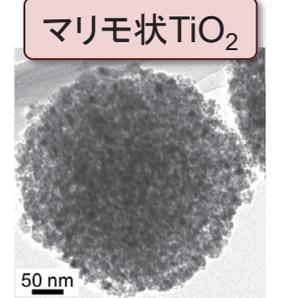
結晶構造



結晶性・一次粒子形状



二次粒子形状



種々の材料化学的要素(結晶構造, 結晶性, 一次・二次粒子の形状)を最適化し, ルチル型TiO₂の潜在的性能を引き出すことに成功!

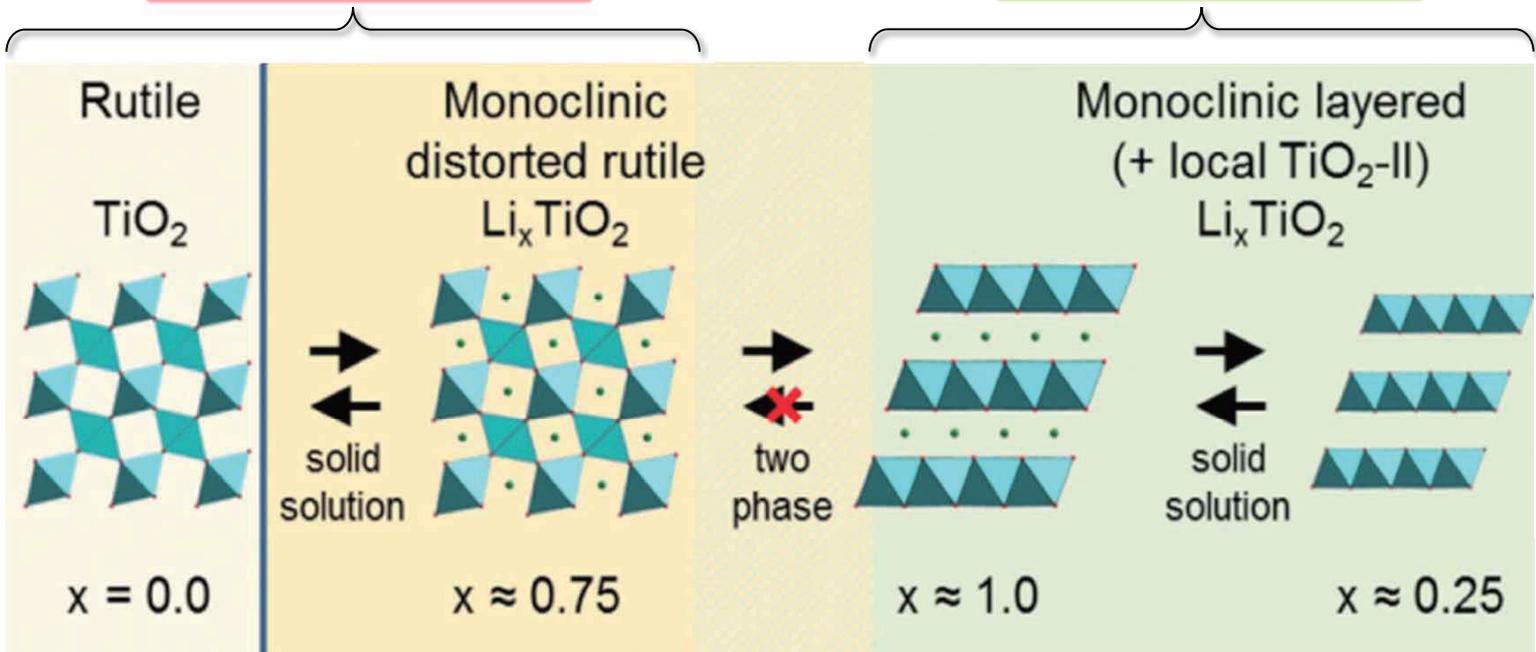
Li吸蔵にともなうルチル型TiO₂の相変化

Li⁺を多く吸蔵すると, ルチル型から層状岩塩型に変化する

C. K. Christensen, M. A. H. Mamakhel, A. R. Balakrishna, B. B. Iversen, Y.-M. Chiang, D. B. Ravnsbæk, *Nanoscale*, 11 (2019) 12347.

ルチル型構造 (P4₂/mnm)

層状岩塩型構造 (P2/m)



□ Li吸蔵にともなうルチル型TiO₂の相変化の確認

□ 不純物元素をドーピングしたTiO₂の構造解析と充放電特性評価

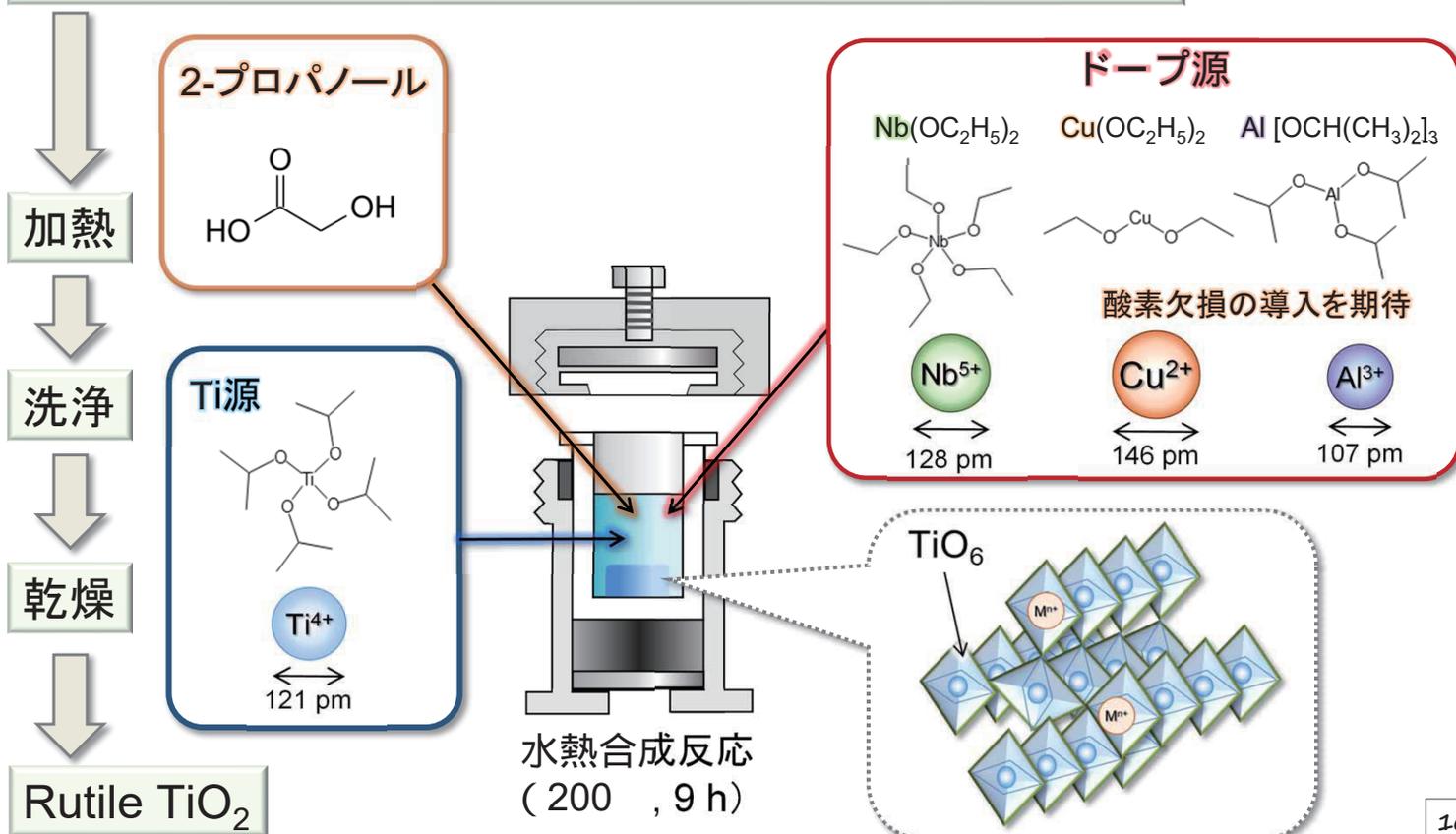


2021年3月導入 (Windows版)

9

水熱合成法による不純物ドーピングTiO₂の調製

金属源とプロパノールをグリコール酸水溶液中で攪拌

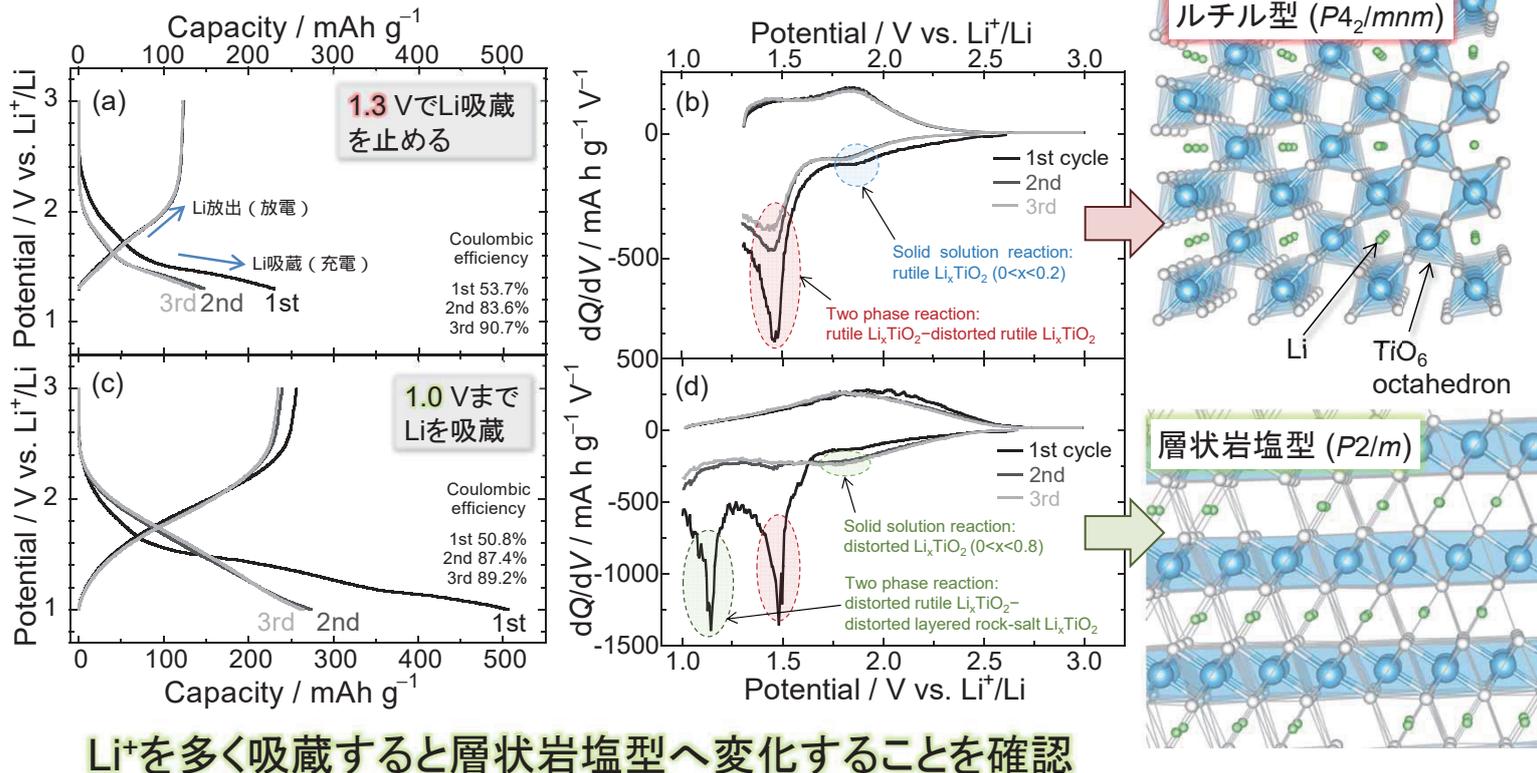


10

Li吸蔵にともなうルチル型TiO₂の相変化

Confidential

ドープ無しのTiO₂からなる負極の充放電曲線



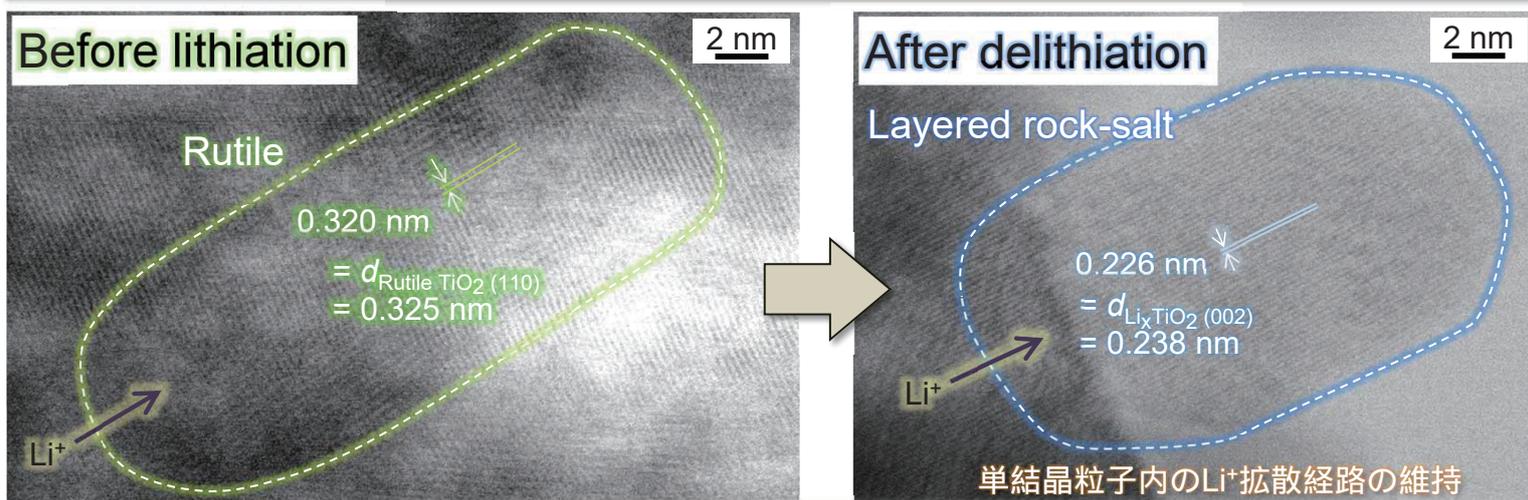
Li⁺を多く吸蔵すると層状岩塩型へ変化することを確認

H. Usui, Y. Domi, T. H. Nguyen, S. Izaki, K. Nishikawa, T. Tanaka, H. Sakaguchi, *Electrochemistry*, **90** (2022) 037002.

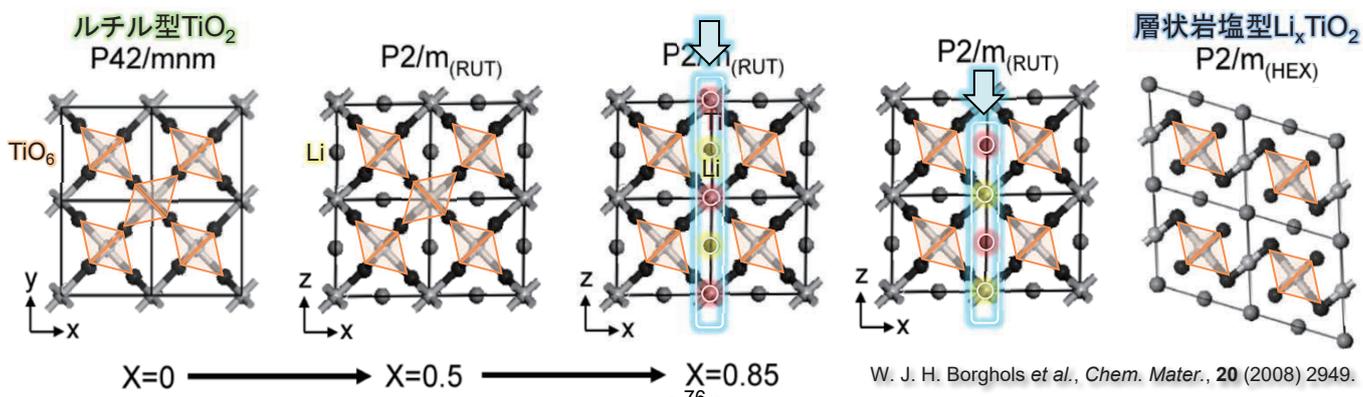
11

単結晶TiO₂の相変化の確認

Confidential

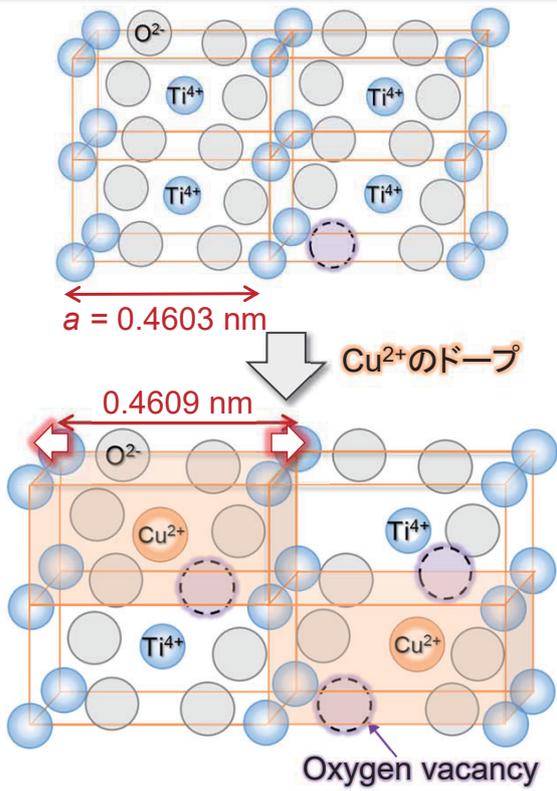


H. Usui, Y. Domi, T. H. Nguyen, S. Izaki, K. Nishikawa, T. Tanaka, H. Sakaguchi, *Electrochemistry*, **90** (2022) 037002.



12

種々の不純物元素のドーピング



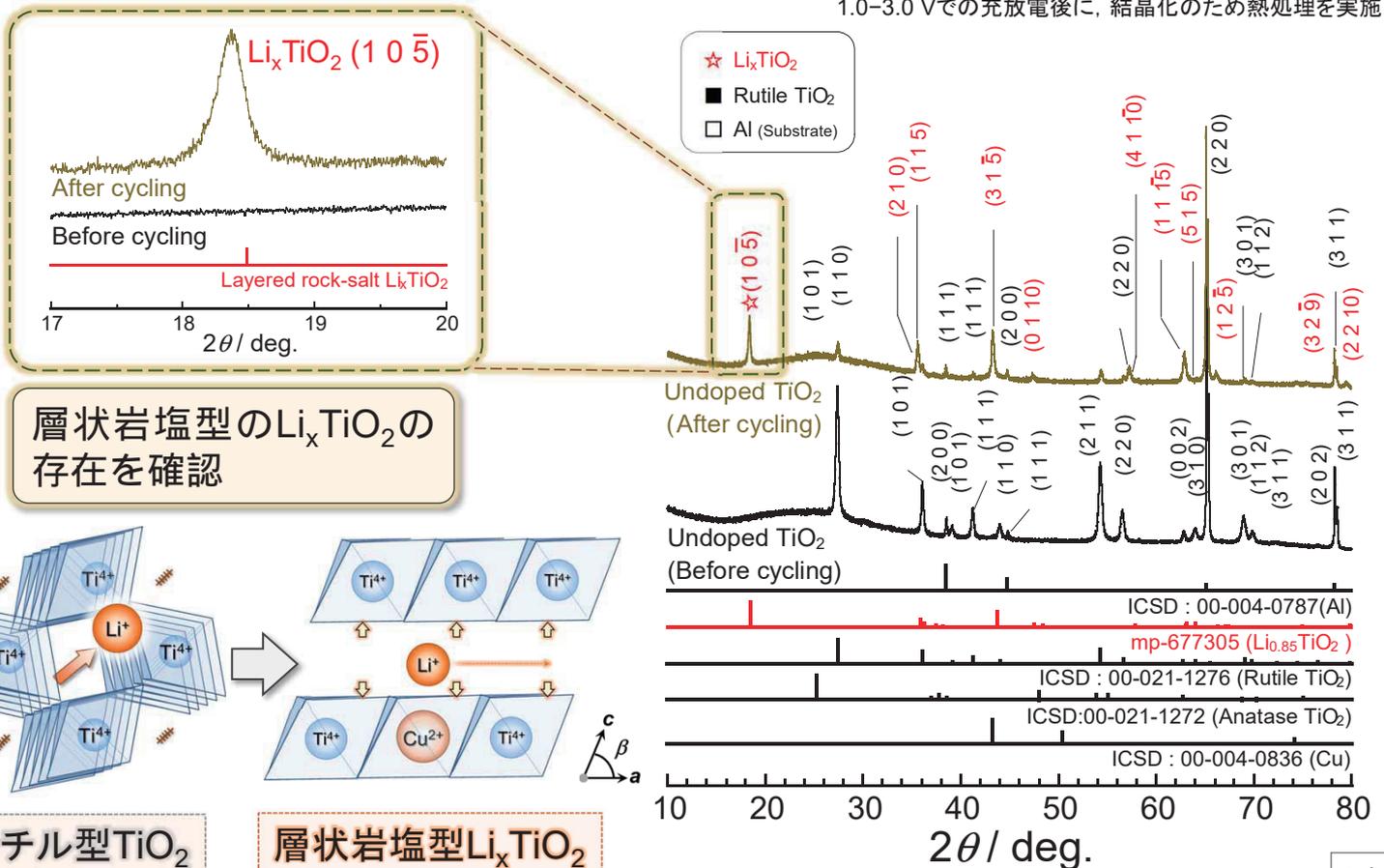
Dopant (M)	Ionic diameter / pm	Lattice parameter		Oxygen vacancy amount (y in M_xTiO_{2-y})
		a / nm	c / nm	
1 at.% Cu ²⁺	146	0.4609	0.2955	0.26
3 at.% Al ³⁺	107	0.4601	0.2954	0.31
4 at.% Nb ⁵⁺	128	0.4609	0.2962	0.11
Undoped (Ti ⁴⁺)	121	0.4603	0.2958	0.10
Standard data of TiO ₂ (ICSD No. 00-021-1276)		0.4593	0.2959	0

	Conductivity / S cm ⁻¹	
Undoped TiO ₂	4.0×10^{-2}	酸素欠損導入により、少量のドーピングでも導電性が向上
Cu-doped TiO ₂	4.5×10^{-1}	
Nb-doped TiO ₂	9.0×10^{-2}	

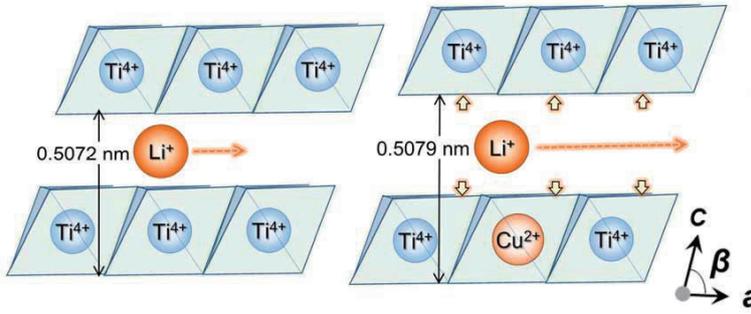
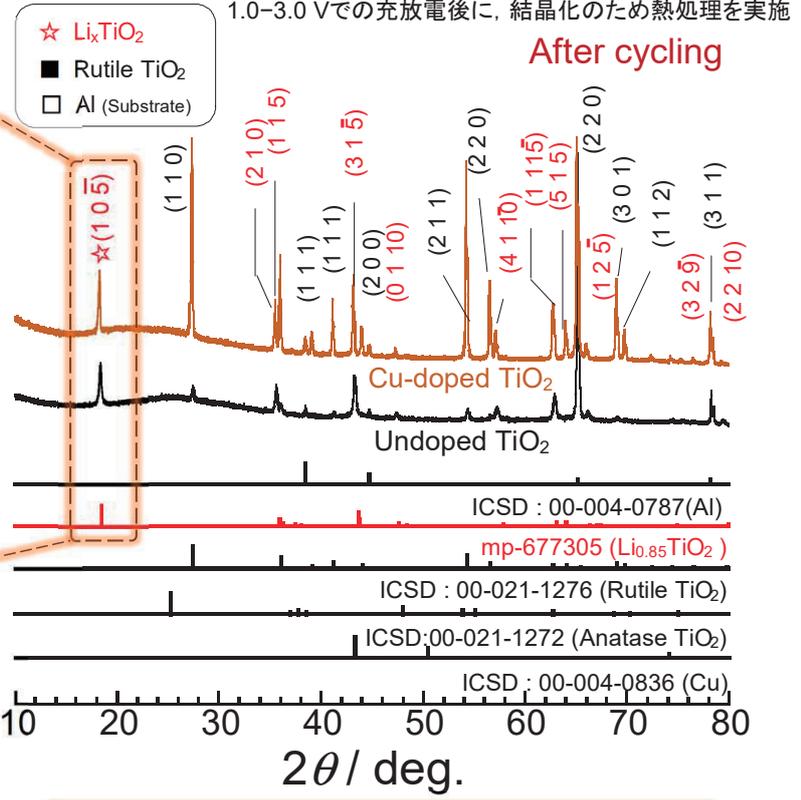
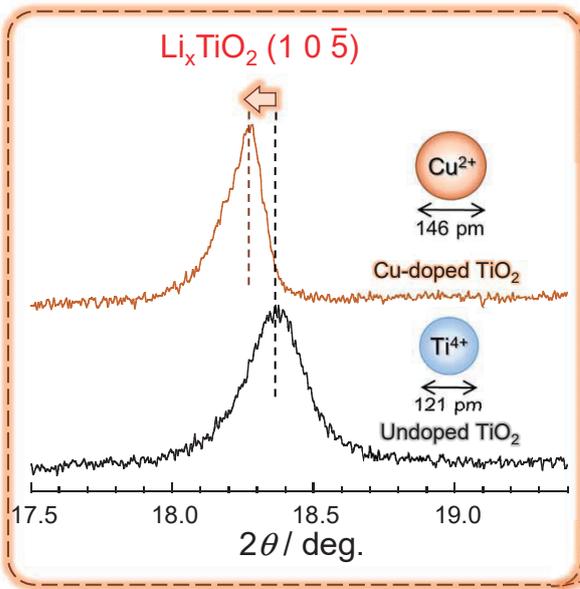
H. Usui, Y. Domi, T. H. Nguyen, S. Izaki, K. Nishikawa, T. Tanaka, H. Sakaguchi, *Electrochemistry*, **90** (2022) 037002.

充放電前後のTiO₂のX線回折パターン

1.0-3.0 Vでの充放電後に、結晶化のため熱処理を実施

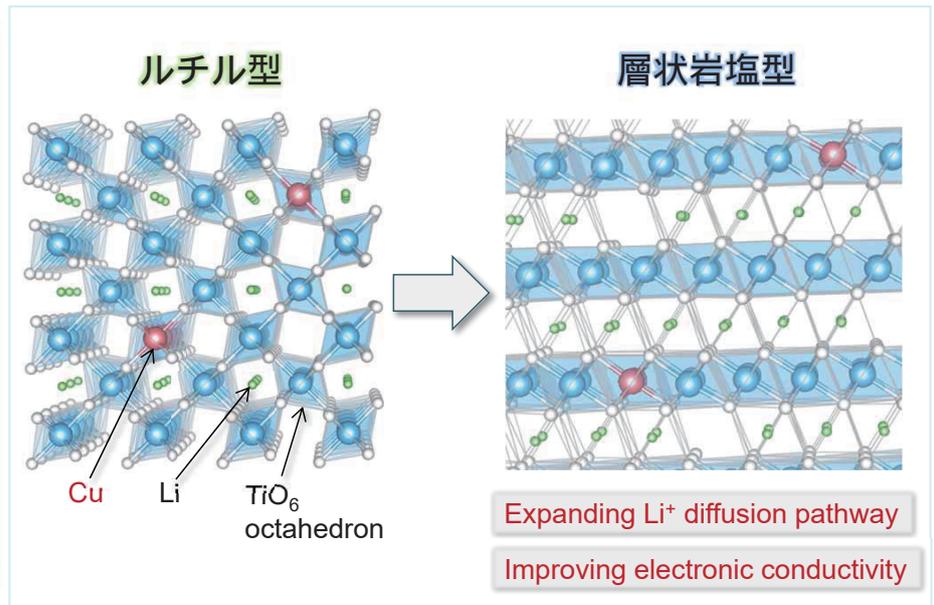
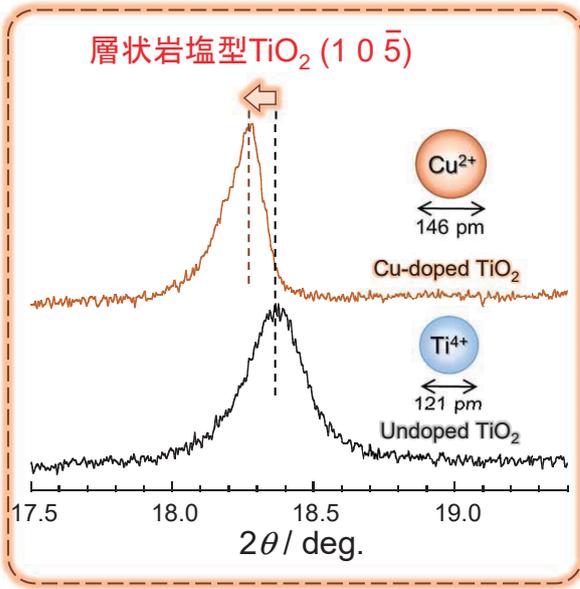


充放電後のCu-doped TiO₂の構造解析



層状岩塩型TiO₂への不純物ドーブを初めて確認

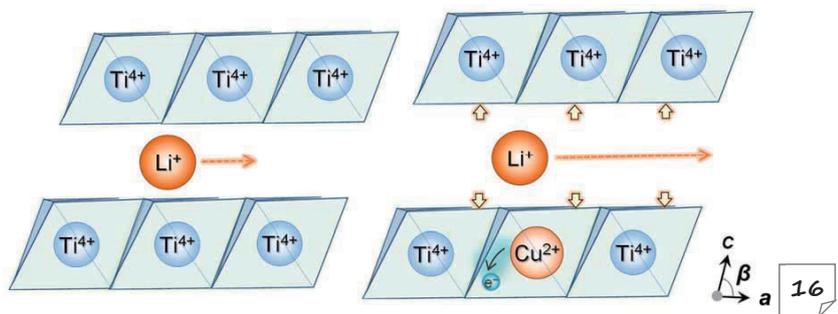
Li吸蔵により相変化したCu-doped TiO₂の構造解析



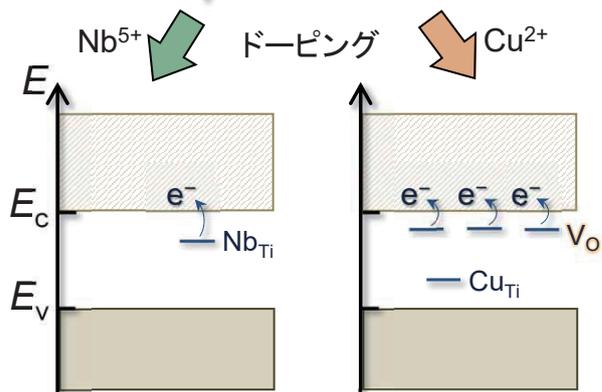
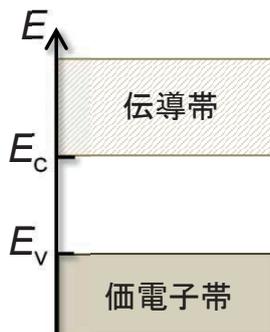
層状岩塩型TiO₂への不純物ドーブの効果

Li⁺拡散経路のサイズの拡大

電子伝導性の改善

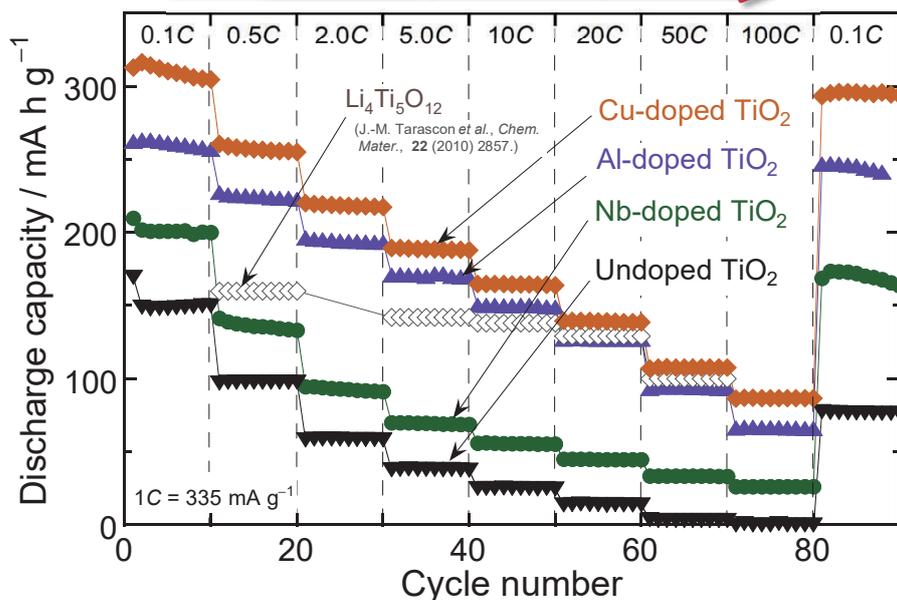


TiO₂の電子構造



酸素欠損の増加による
電子伝導性の向上

より素早いLi+吸蔵-放出反応

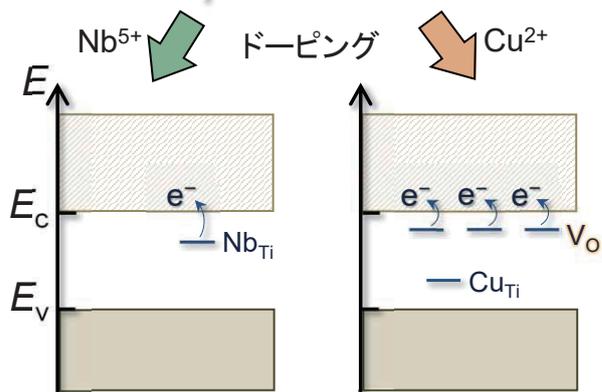
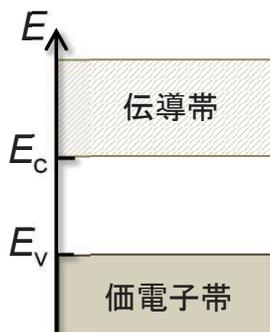


CuのドーピングによりTiO₂の電子伝導性が向上し
高速充放電性能の大幅な改善に成功した。

H. Usui, Y. Domi, T. H. Nguyen, S. Izaki, K. Nishikawa, T. Tanaka, H. Sakaguchi, *Electrochemistry*, **90** (2022) 037002.

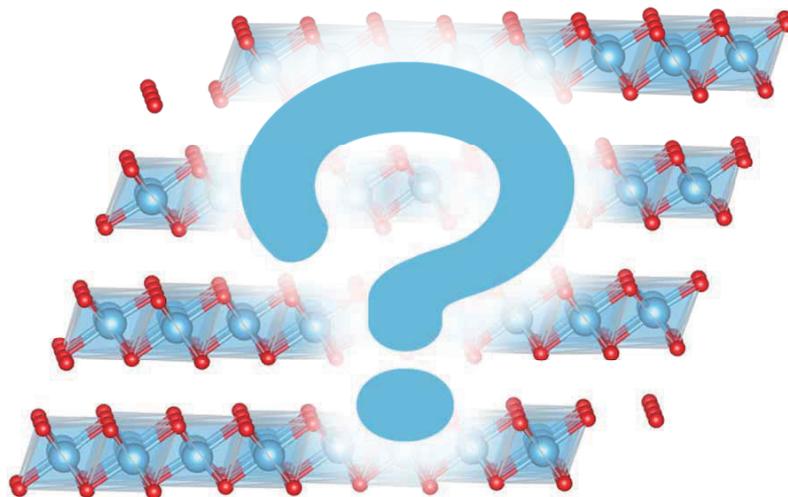
第一原理計算解析の必要性

TiO₂の電子構造

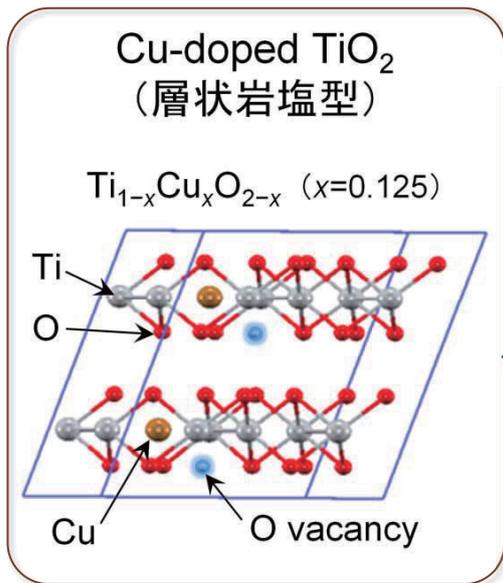


酸素欠損の増加による
電子伝導性の向上

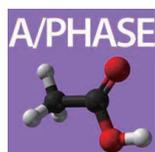
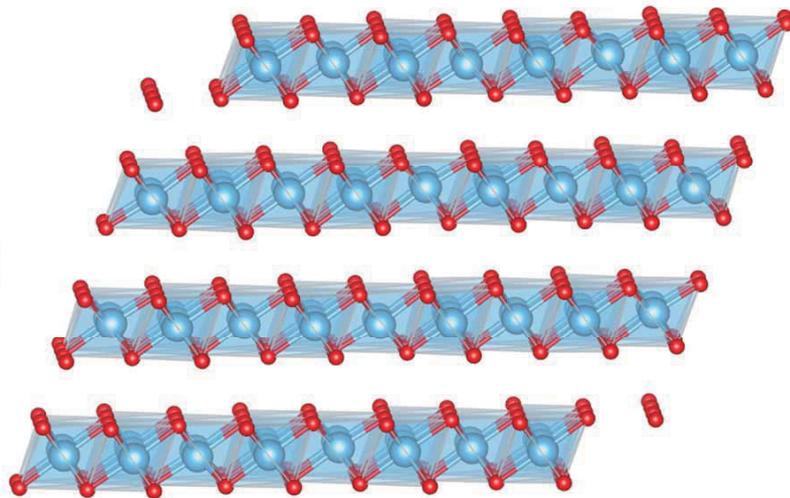
層状岩塩型TiO₂の電子構造は未報告



不純物ドーピングが層状岩塩型TiO₂の電子構造に
与える影響を計算で調べる必要がある



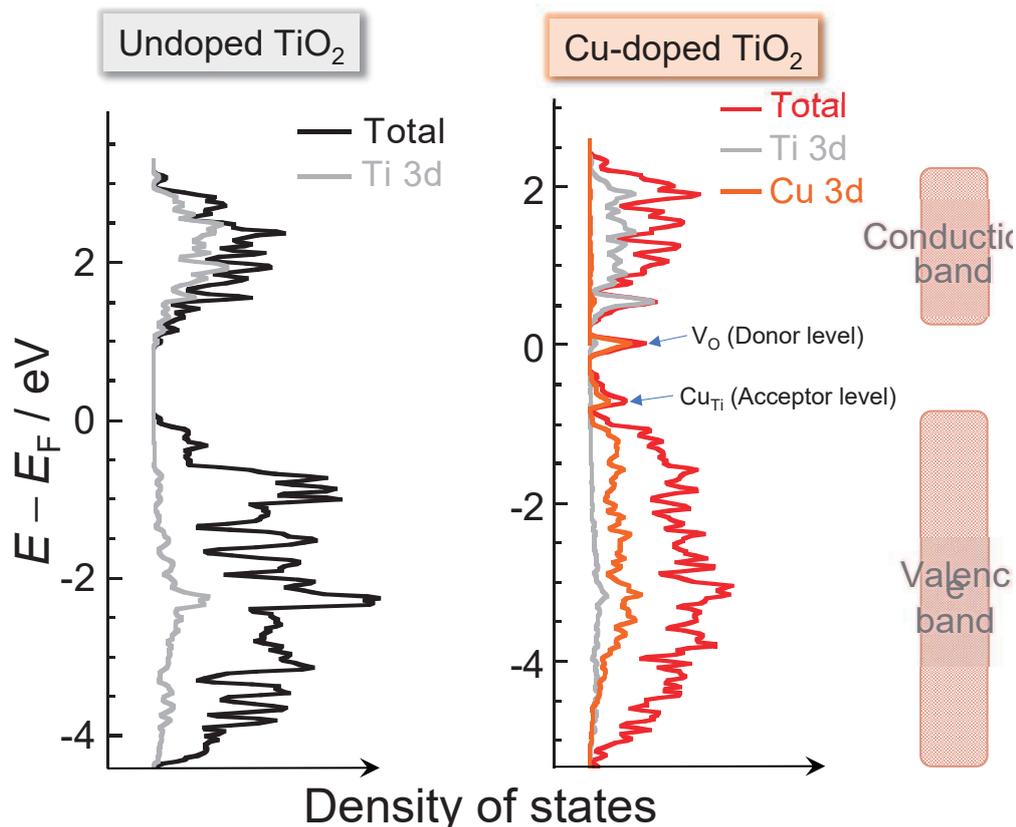
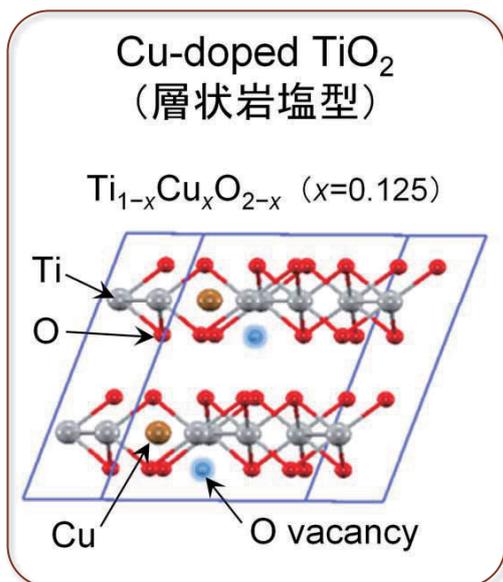
第一原理計算プログラム (Advance/PHASE) を用いて層状岩塩型TiO₂の電子状態を解析



計算手法: PAW (Projector Augmented Wave)
 交換相関汎関数: GGA (Generalized Gradient Approximation)
 カットオフエネルギー : 340 eV (波動関数)
 : 3060 eV (電荷密度)
 k点: 2 × 2 × 2, 収束判定: ΔE < 2.7 × 10⁻⁸ eV

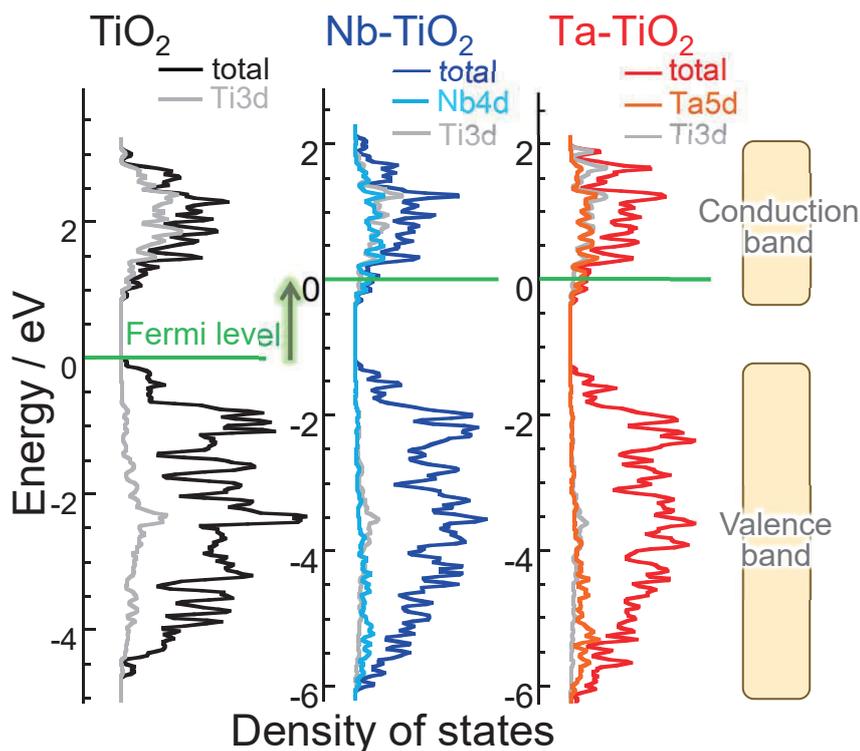
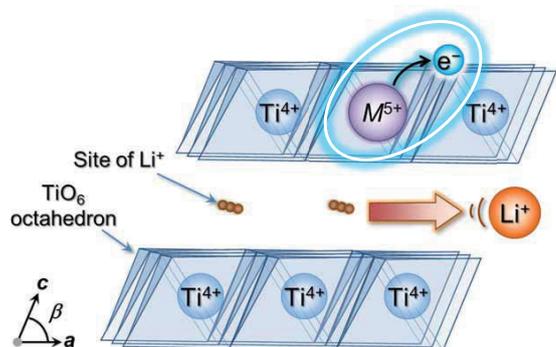
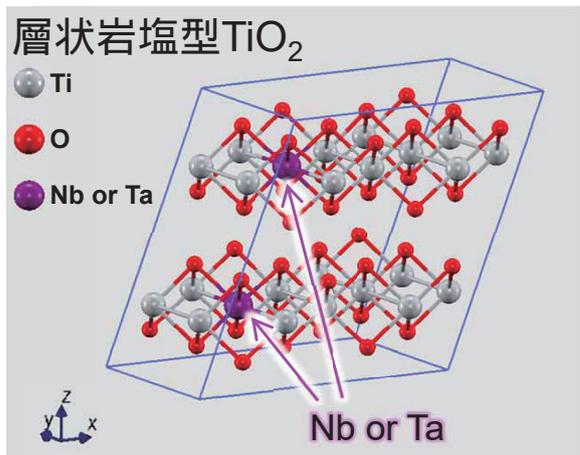
2021年3月導入 (Windows版)

CuドーブTiO₂の状態密度の計算



CuをドーブしたTiO₂は層状岩塩型においても電子伝導性が向上

第一原理計算プログラム (Advance/PHASE)

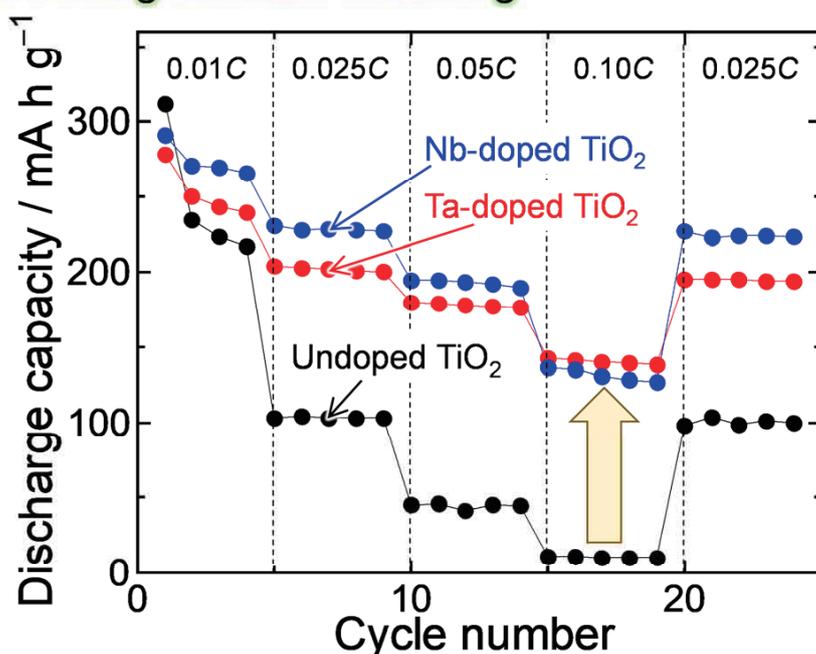
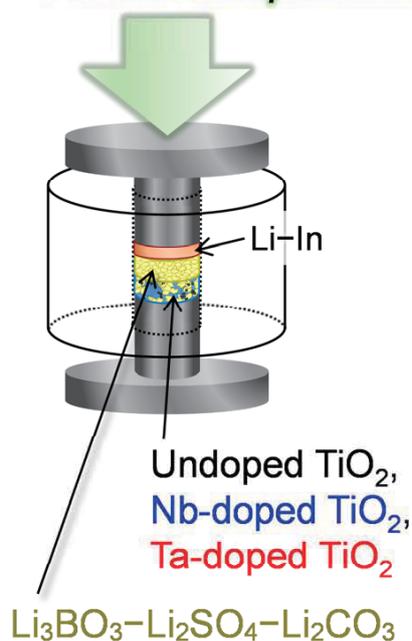


層状岩塩型へのドーブにより電子伝導性が向上することがわかった。

21

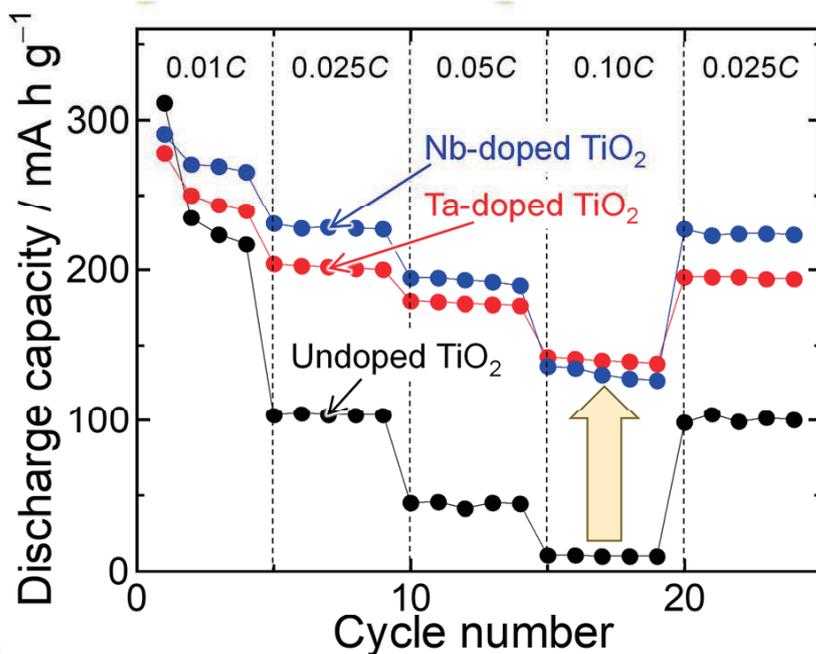
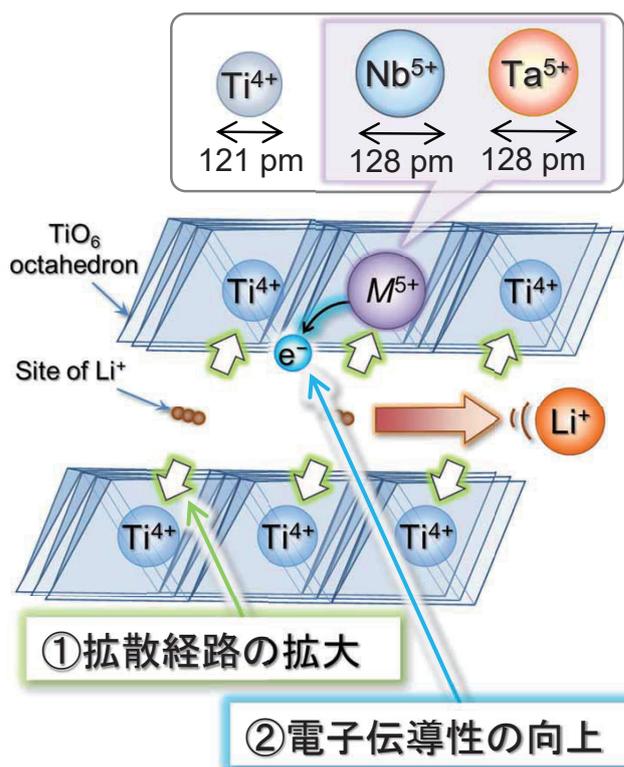
酸化物系全固体Li電池への適用

Room-temperature pressing without sintering



室温成型のみで構築したバルク型酸化物系負極の充放電に初めて成功！

不純物元素のドーブによりレート特性が向上

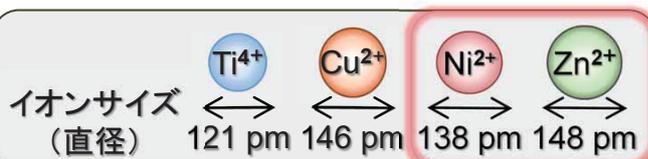
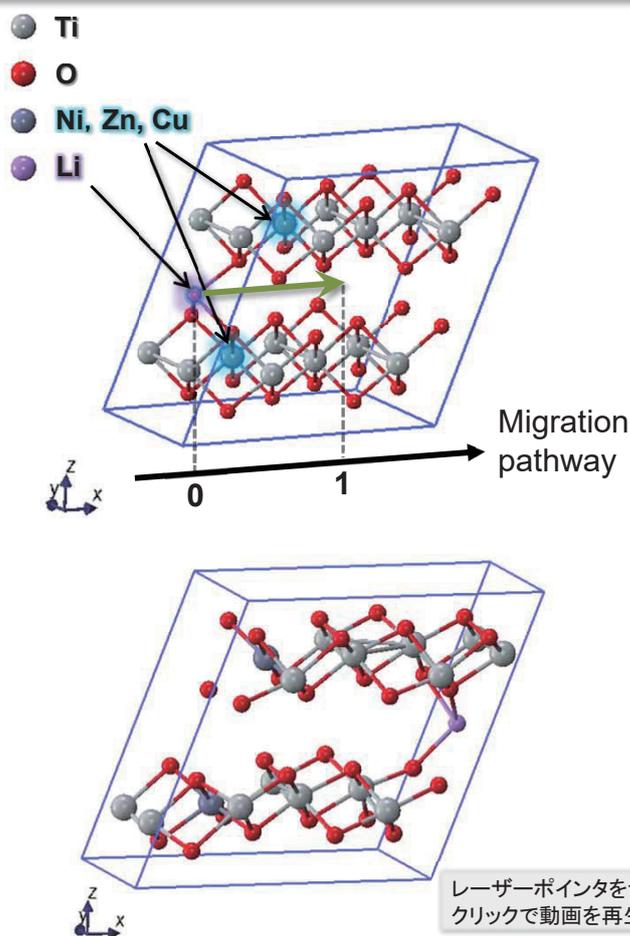


不純物元素のドーピングによりレート特性が向上

H. Usui, Y. Domi, S. Izaki, A. Nasu, A. Sakuda, A. Hayashi, H. Sakaguchi, *J. Phys. Chem. C*, **126** (2022) 10320.

23

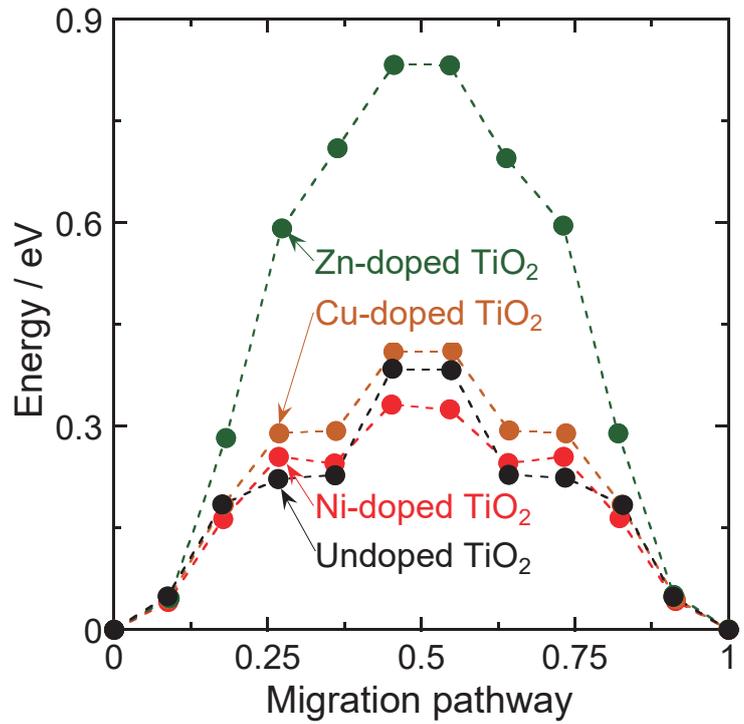
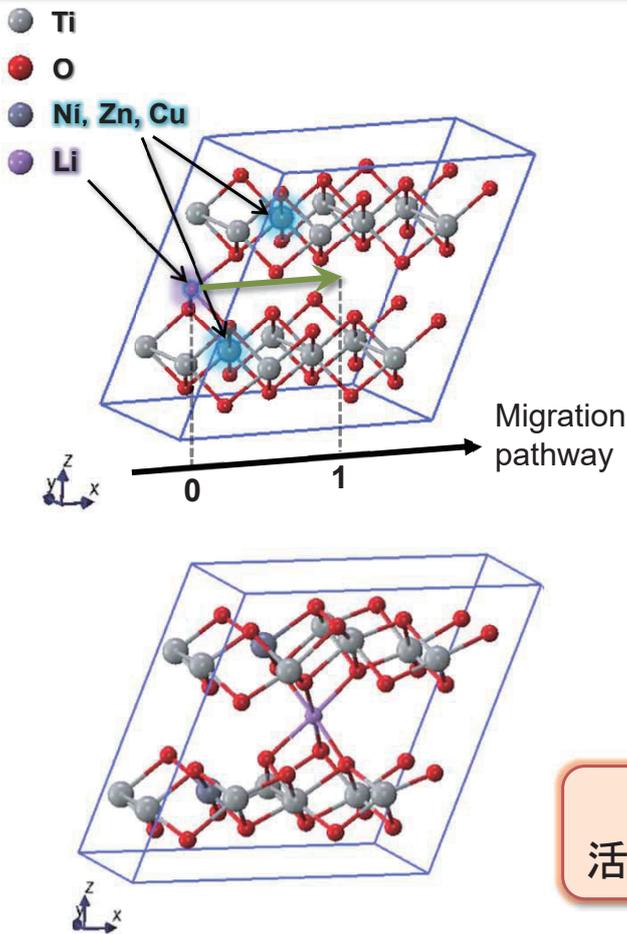
2価カチオンのドーピングの効果の解析



第一原理計算プログラム
 Advance/PHASE
 計算方法:
 NEB (Nudged Elastic Band) 法
 計算手法:
 PAW (Projector Augmented Wave)
 交換相関汎関数:
 GGA (Generalized Gradient Approximation)
 カットオフエネルギー
 : 12.5 Hartree (波動関数)
 k点: $3 \times 5 \times 3$
 収束判定
 : 1.0×10^{-9} Hartree (SCF)
 : 2.0×10^{-4} Hartree/bohr (構造最適化)
 : 1.5×10^{-3} Hartree/bohr (NEB計算)

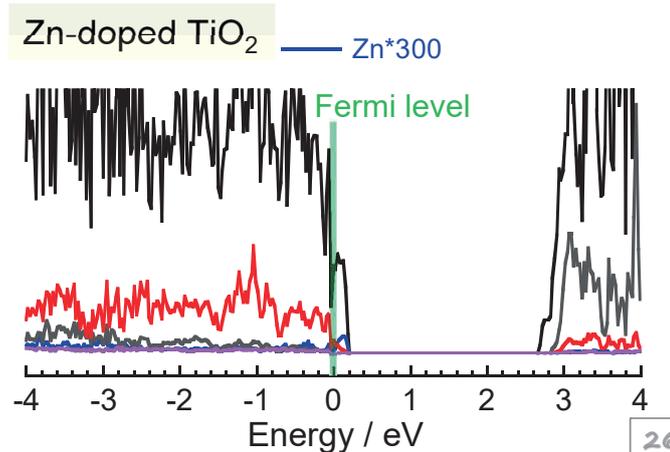
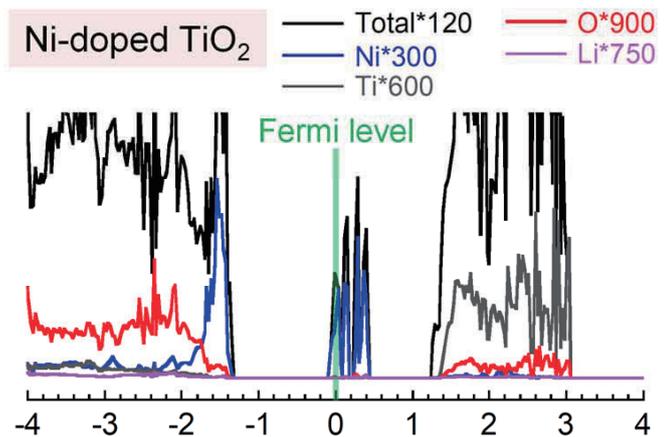
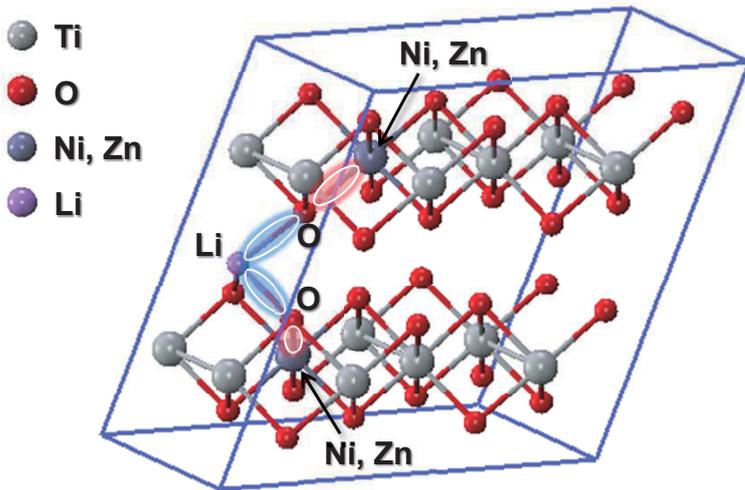
24

Li拡散に要する活性化エネルギーの計算結果



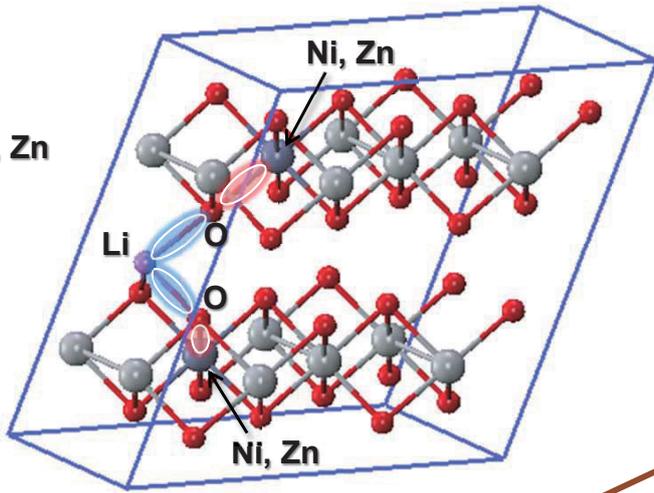
Niをドーピングした場合のLi拡散に要する活性化エネルギーが最も小さいことを確認した。

始状態における各元素の状態密度

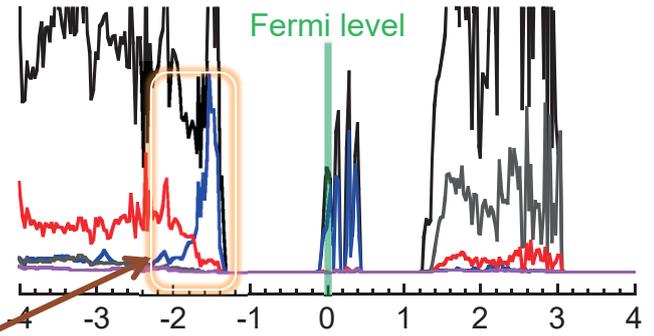


始状態における各元素の状態密度

- Ti
- O
- Ni, Zn
- Li



Ni-doped TiO₂ — Total*120 — O*900
 — Ni*300 — Li*750
 — Ti*600

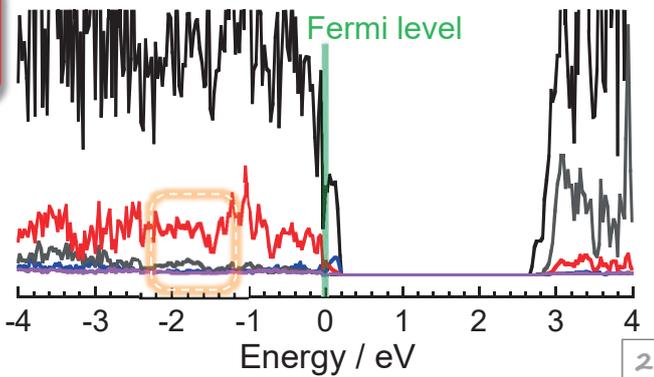


同じエネルギー領域にNiとOの電子の状態密度が存在し、共有結合の形成が示唆される。



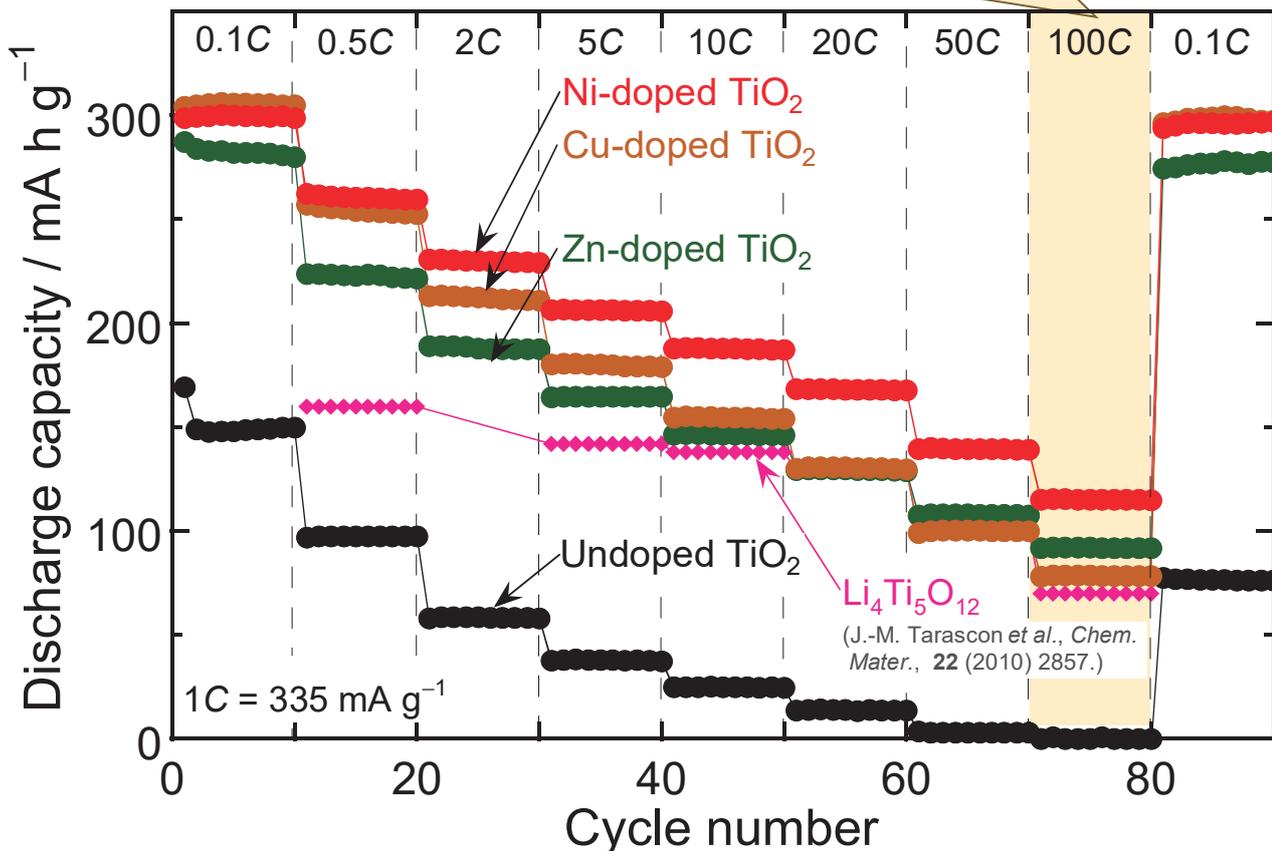
Oの電子が少なくなることで、Liとこれの結合が弱くなり、活性化エネルギーが小さくなった。

Zn-doped TiO₂ — Zn*300

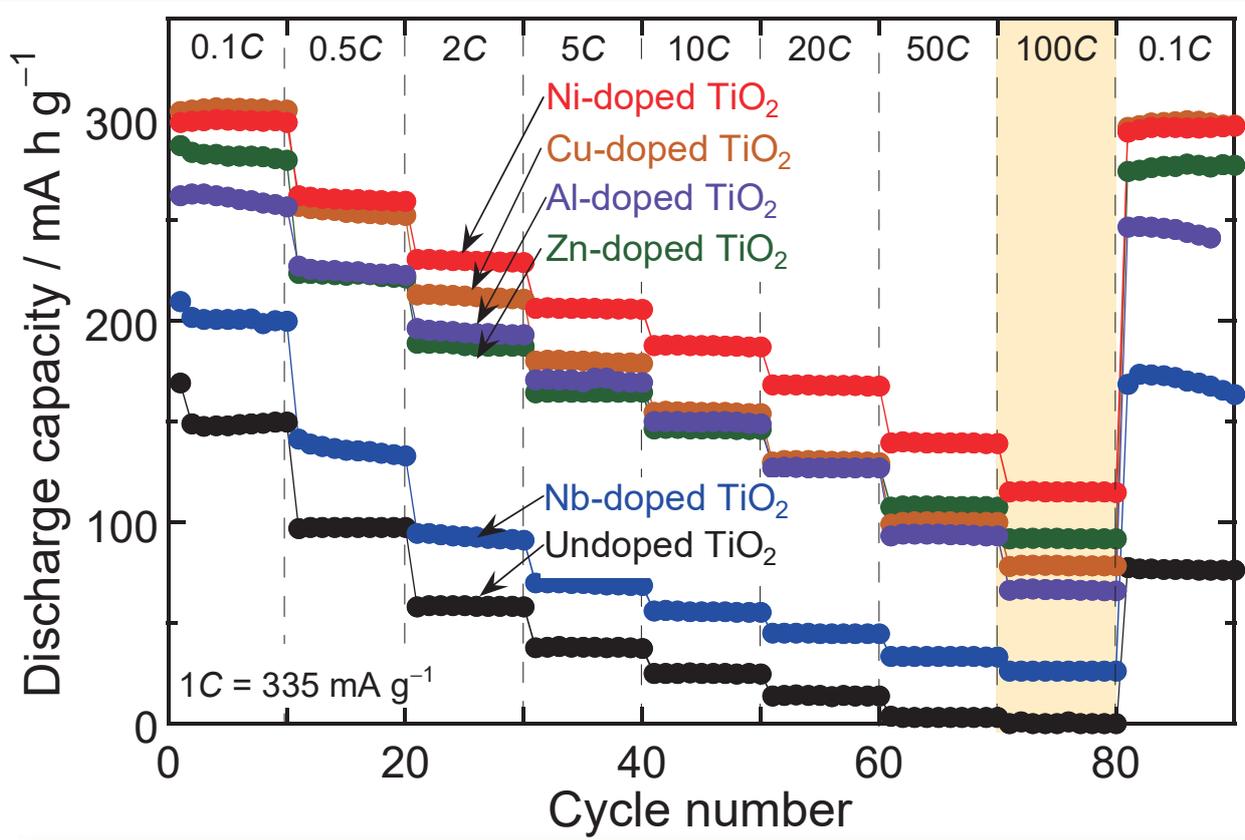


2価カチオンをドーブしたTiO₂電極の高速充放電性能

約30秒の短時間での高速充放電

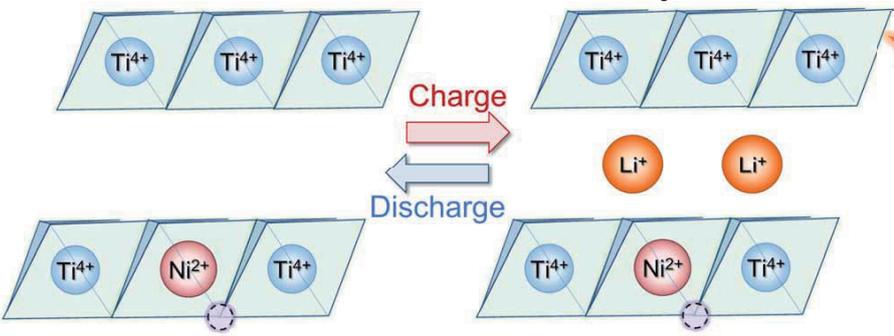
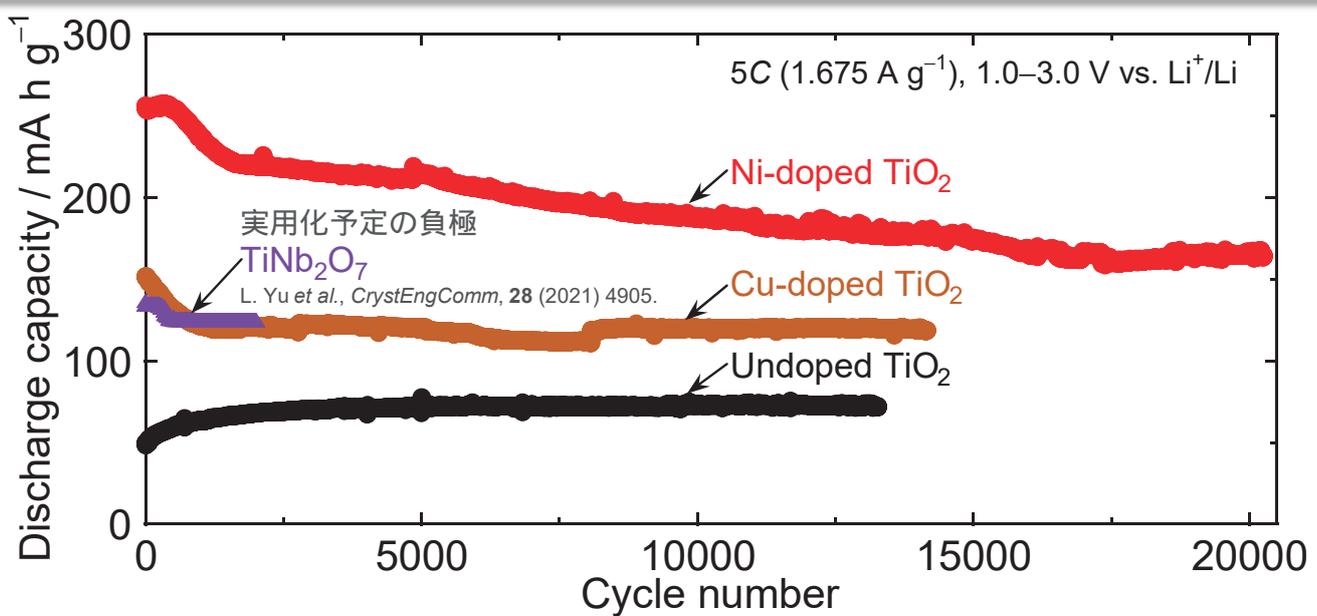


種々の不純物元素をドーピングしたTiO₂電極の高速充放電性能



計算での予測通り, Ni-doped TiO₂電極が最も優れた性能を発揮

種々の不純物元素をドーピングしたTiO₂電極の高速充放電性能



充放電時の体積変化が非常に小さい(1%)

長期間, 結晶構造を安定に維持

まとめ

単結晶ルチル型TiO₂を用いた次世代蓄電池負極材料の研究開発を行った。

- Cu²⁺などの不純物カチオンのドーピングにより、TiO₂の電子伝導性が向上するとともにLi⁺の拡散経路のサイズが広がり、リチウムイオン電池負極性能が改善された。
- 第一原理計算により、酸素欠損由来の不純物準位の形成を確認した。また、Ni²⁺のドーピングにより、TiO₂結晶中のLi⁺拡散が容易になることを確かめた。
- これらの知見は、**全固体Li電池**においても同様に活用できることを見出した。

Acknowledgements

科研費
KAKENHI



研究開発推進事業
A-STEP

JACI



本研究の遂行にあたり、坂口裕樹教授(工学部長)、道見康弘准教授より頂いた支援と助言に深く感謝する。第一原理計算の解析において、星健夫准教授より有益な助言を頂いた。TEM観察および酸素量分析はNIMSの西川慶博士および鳥取県産業技術センターの田中俊行博士の協力により実施した。本研究の一部は、JSPS研究費、JST A-STEP産学共同(育成型)[課題番号JPMJTR20T2]、および新科学技術推進協会の助成を受けて実施した。関係各位に謝意を表す。

31

Tottori University Faculty of Engineering building seen from the central square



Thank you for your attention.



The mascot of the University is a mandarin duck, the symbol bird of Tottori Prefecture, and represents that the University develops with the local community.

32

関連サービスのご紹介

アドバンスソフトの プログラム資産活用サービス



お客さまのニーズ	当社が提供できるサービス	お客さまが得られる成果 
古いプログラムを最新の環境で動作できるようにしてほしい。	新しい Fortran の仕様に従ってプログラムを修正します。	パソコンからクラウドまでさまざまな環境でプログラムを実行できるようになり、研究効率が向上します。
属人化していたプログラムの担当者が退職や異動してしまって、プログラムの活用に困っている。	プログラムの調査をし、ドキュメントやマニュアルの作成、実行手順書を作成するなどサポートを行います。	ドキュメントやマニュアル、実行手順書を基にしてプログラムの問題点、活用方法、スキルやノウハウの継承ができるようになります。
テキストベースで使い難く、計算結果も分かり難い。	GUI を開発し実装するなど使い勝手がよくなるように、メンテナンスを行います。	さまざまな人が利用可能となり、業務効率向上や業務短縮に繋がります。将来的な商用化の基礎となります。
計算時間がかかるので、短縮したい。 	プログラムの時間計測を行い高速化・並列化を施します。 	計算時間が短縮され解析結果の検討時間が確保できます。また、解析ケースを増やすことができたり、モデル形状の変更パラメータを変更しての解析の時間もとれたりできます。加えて、実験をシミュレーションに置き換えることができ、コスト削減につながります。

アドバンスソフトの開発・解析サービス

お客さまのご要望に応じて科学技術計算ソフトウェアの新規開発、機能追加、受託解析等のサービスをおこないます。



1. 流体・構造・ナノ関連など幅広い分野のソフトウェアを開発し、解析経験がある技術者がお客さまのご要望をお伺いいたします。

2. 最適な解析方法をご提案いたします。

3. お客さまのご了解が得られましたら、モデリングを行い、解析を実施いたします。

4. 解析結果を可視化し、解析結果の評価や考察を行なって報告書を作成いたします。



◇各サービスのご紹介

1. パッケージソフトウェアの販売・サポート

アドバンスソフトが取り扱っているパッケージソフトウェアは、国家プロジェクトまたは自社により開発した日本の国産製品です。

ソースコードを熟知した開発者が直接お客さまのご質問にお答えするため、迅速で的確なサポートサービスをご提供することが出来ます。また、お客さまのご要望に沿ったカスタマイズを行うことも可能です。

2. ソフトウェアの受託開発サービス

お客さまの解決すべき課題に則した、計算科学技術用のソフトウェアを新規に開発いたします。また、お客さまが現在ご利用になっているソフトウェアへの機能追加および改良にも対応いたします。

3. 解析サービス

計算科学用ソフトウェアを用いた解析計算を行います。さらに、その結果をシミュレーションの専門家ならではの見識をもって評価しご報告いたします。各種分野の専門技術者が、「お客さまの課題解決にはどのような手法が有効であるか。」といったご相談にも対応させていただきます。

4. コンサルティング

CAEに関わる様々な課題をお客さまと一緒に解決すべく、専門研究者がコンサルティングサポートをさせていただきます。また、「フリーソフトを使ってみたいがサポート体制が無いので不安がある。」といった声にお応えして、ParaView、LAMMPSといったフリーソフトのコンサルティングもいたします。

ご清聴ありがとうございました。

アドバンスソフトは、高度な技術力、開発力、人材を武器に、最先端理論を応用した解析シミュレーションソフトウェアを開発・販売しています。受託解析、受託開発、パッケージソフトウェア、コンサルティング等多様なソリューションを通じて、お客様の問題解決に即戦力として貢献します。

お問い合わせ先:ご担当営業まで
TEL:03-6826-3971 FAX:03-5283-6580
E-mail:office@advancesoft.jp



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。

警告

このレポートに収録されている文章および内容については、ご自身のために役立てる用途に限定して無料配布しています。このレポートを、販売、オークション、その他の目的で利用するには、著作権者の許諾が必要になります。このレポートに含まれている内容を、その一部でも著作権者の許諾なしに、複製、改変、配布を行うことおよびインターネット上で提供する等により、一般へ送ることは法律によって固く禁止されています。