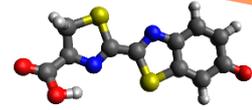


# ナノ材料シミュレーションセミナー

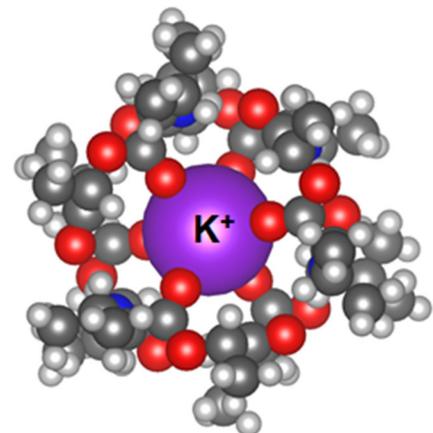


## ～古典分子動力学、量子化学計算、第一原理計算、GUI～

2019年1月24日(木) 開催

### プログラム

13:00	(開場)	
13:20~13:25 (5分)	アドバンスソフト株式会社の紹介 主催者挨拶 .....	1 代表取締役社長 松原 聖
13:25~13:55 (30分)	古典 MD 計算ソフトウェア LAMMPS によるサービスのご紹介 .....	4 研究員 田中 大地
13:55~14:25 (30分)	量子化学計算ソフトウェア NWChem によるサービスのご紹介 .....	14 主事研究員 鈴木 鉄兵
14:25~14:55 (30分)	第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE のご紹介 .....	26 主管技師長 岡崎 一行
14:55~15:05 (10分)	(休憩)	
15:05~16:05 (60分)	<b>特別講演</b> 「マルチフィジックス・マルチスケールシミュレーションの 材料設計・プロセス設計への応用と今後の展望」	※資料は非公開です 東北大学金属材料研究所教授 久保 百司 様
16:05~16:35 (30分)	ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo のご紹介 .....	40 主管研究員 西原 慧径
16:35~16:45 (10分)	価格および関連サービスのご紹介 .....	44 営業部 東田 想太 ※資料は一部非公開です
16:45	(閉会)	



$$d(K^+-O) = 2.749 \text{ \AA}$$

AdvanceSoft





# アドバンスソフト株式会社のご紹介

ナノ材料シミュレーションセミナー  
 ～古典分子動力学、量子化学計算、第一原理計算、GUI～  
 2019年1月24日（木）  
 アドバンスソフト株式会社

## 会社概要

名称 アドバンスソフト株式会社  
 (英文 AdvanceSoft Corporation)

本社 〒101-0062  
 東京都千代田区神田駿河台4-3  
 新お茶の水ビル17階  
 TEL: 03-6826-3970  
 FAX: 03-5283-6580

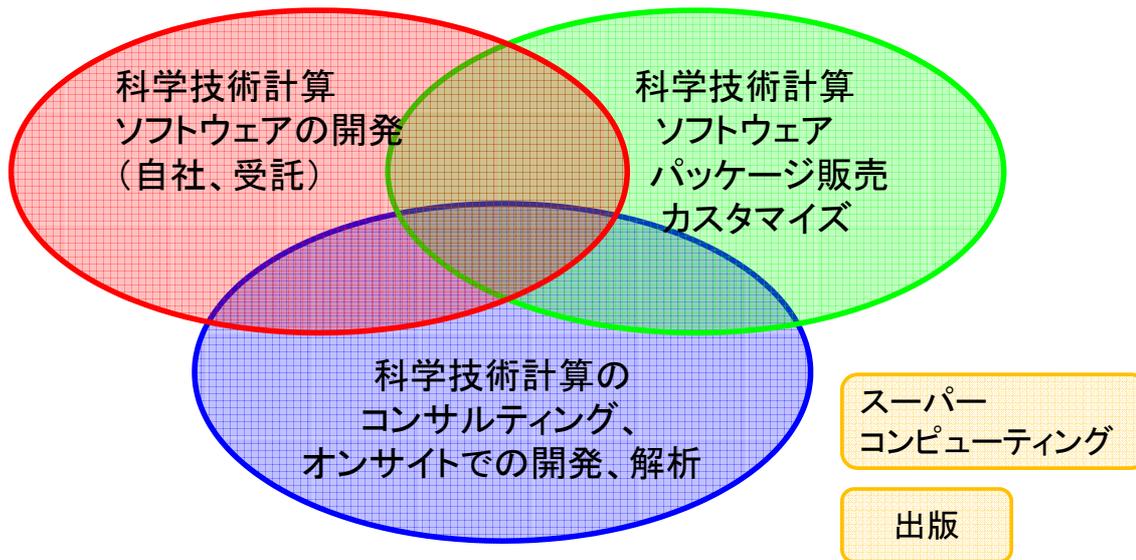
設立 2002年(平成14年)4月24日

資本金 3,724万円

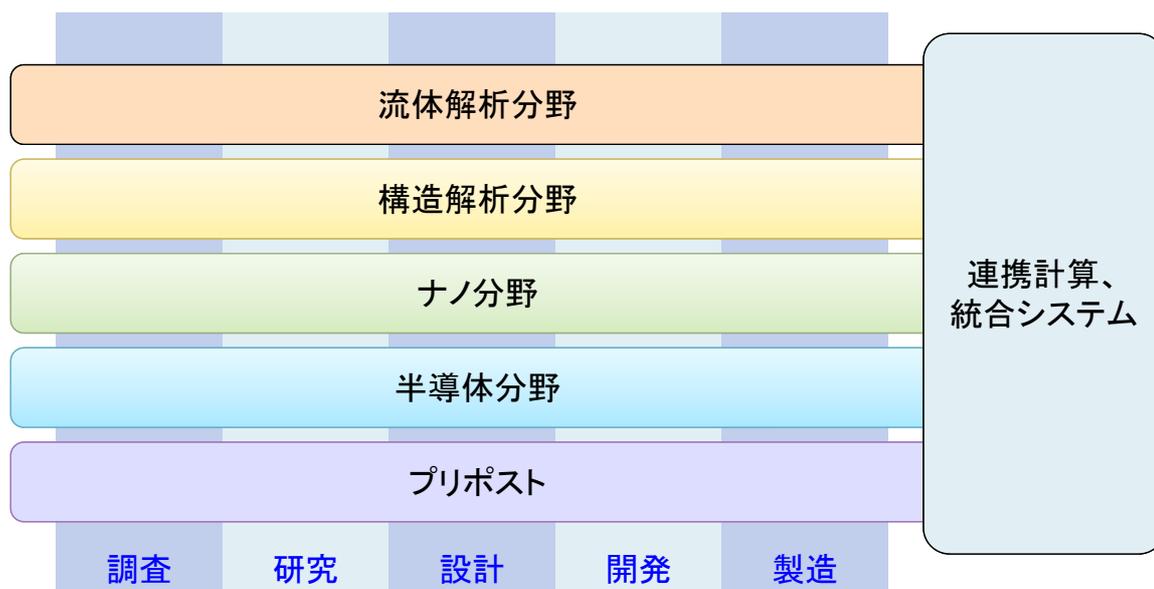
社員数 108名(2018年7月1日時点)

事業部	部	事業内容
第1事業部	材料システム開発室	・材料設計統合システムの開発、および、関連する先端的なナノ分野の事業を企画推進
	ナノシミュレーション研究開発センター	・先端的なナノシミュレーション事業および関連する国プロを企画・推進
	技術第1部	・ナノ材料の第一原理計算の開発・販売・解析、および、分子動力学計算等を利用した解析など
	技術第2部	・構造・音響振動解析、プリポスト、可視化、連成システムの開発など
	技術第6部	・次世代TCAD・光電磁波システムの開発など
第2事業部	技術第4部	・圧縮性流体および混相流に係わる次世代流体システム開発および流体解析など
第3事業部	技術第3部	・乱流、燃焼、化学反応等に係わる次世代流体システム開発および流体解析など
	技術第7部	・J-PARC関連事業およびモデルベース開発など
第4事業部	技術第5部	・原子力・エネルギー利用に係る安全性解析など ・管路系流体解析エンジニアリング業務
	原子力安全解析センター	・原子力安全解析を中心とし二相流・管路解析などのエンジニアリング事業を企画・推進
	リスク研究開発センター	・原子力分野のPRAを中心としてリスク研究開発に係る事業を企画・推進
	総合企画部	・コンサルティング、解析サービスの提供
	営業部	・お客様窓口

## 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。

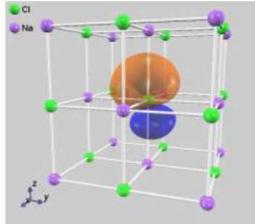
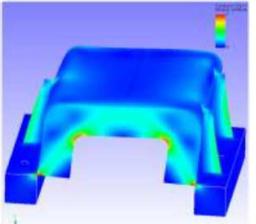
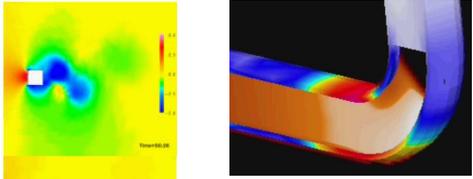
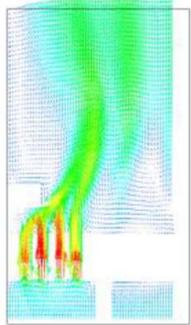
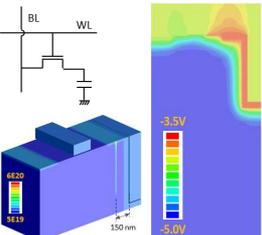
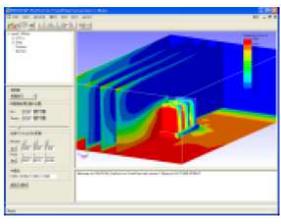


産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、  
科学技術計算によるソリューションをご提供します。

# アドバンスソフトのパッケージソフトウェア



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

<p><b>ナノ</b></p> <p>Advance/PHASE</p> 	<p><b>構造</b></p> <p>Advance/FrontSTR</p> 	<p><b>流体</b></p> <p>Advance/FrontFlow/red    Advance/FrontFlow/FOCUS</p>  <p>Advance/FrontFlow/MP</p>  <p>Advance/FrontNetシリーズ</p> 	
<p><b>半導体</b></p> <p>Advance/TCAD</p> 	<p><b>プリポスト</b></p> <p>Advance/REVOCAP</p> 		

※上記は主要パッケージを掲載しています。詳細は弊社HP([www.advancesoft.jp](http://www.advancesoft.jp/))をご参照ください。

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

5

# facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中



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

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

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



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

6

# LAMMPSによる 解析サービスの説明

第1事業部 技術第1部 田中 大地

ナノ材料シミュレーションセミナー  
～古典分子動力学、量子化学計算、第一原理計算、GUI～  
2019年1月24日（木）  
アドバンスソフト株式会社

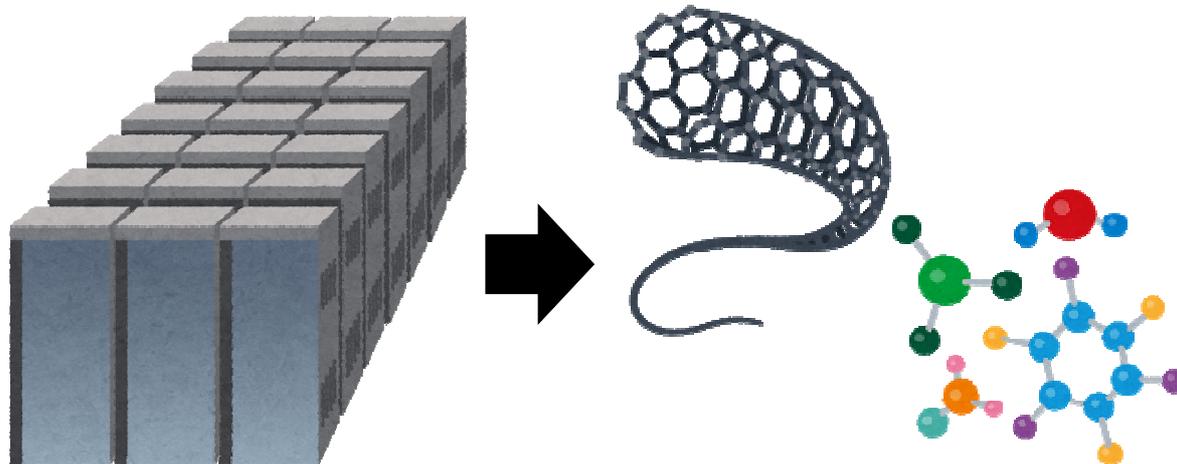
## 概要

- ① LAMMPSについて
- ② 分子動力学計算について
- ③ 主な適用範囲
- ④ 主な適用例

# LAMMPSとは

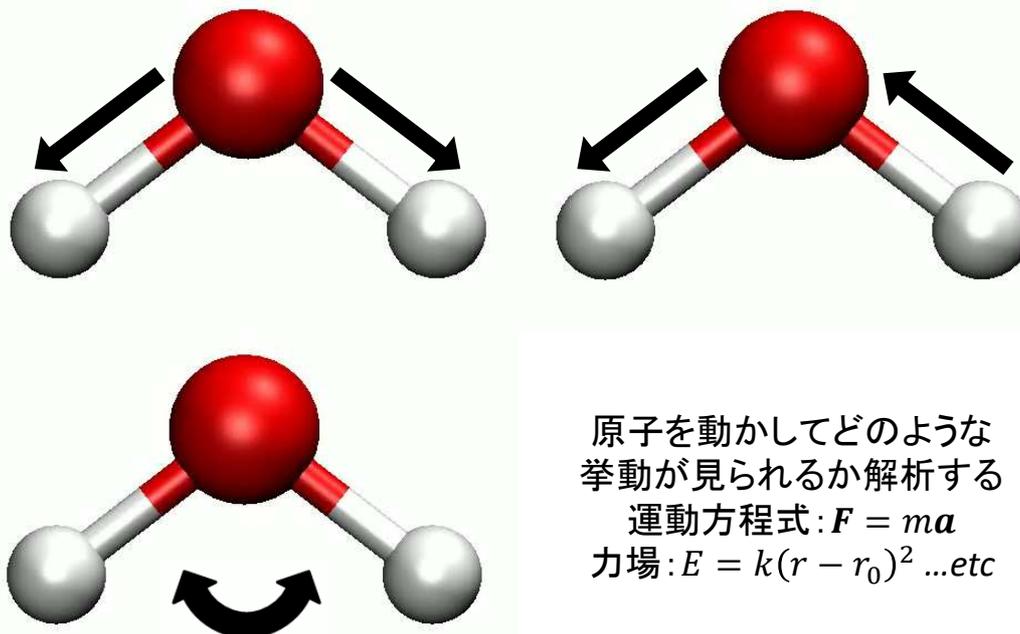
## ➤ 分子動力学計算を行うためのソフトウェア

- Sandia National Laboratoriesで開発されたGPL条項の下で配布されているOSS(オープンソースソフトウェア)
- Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator



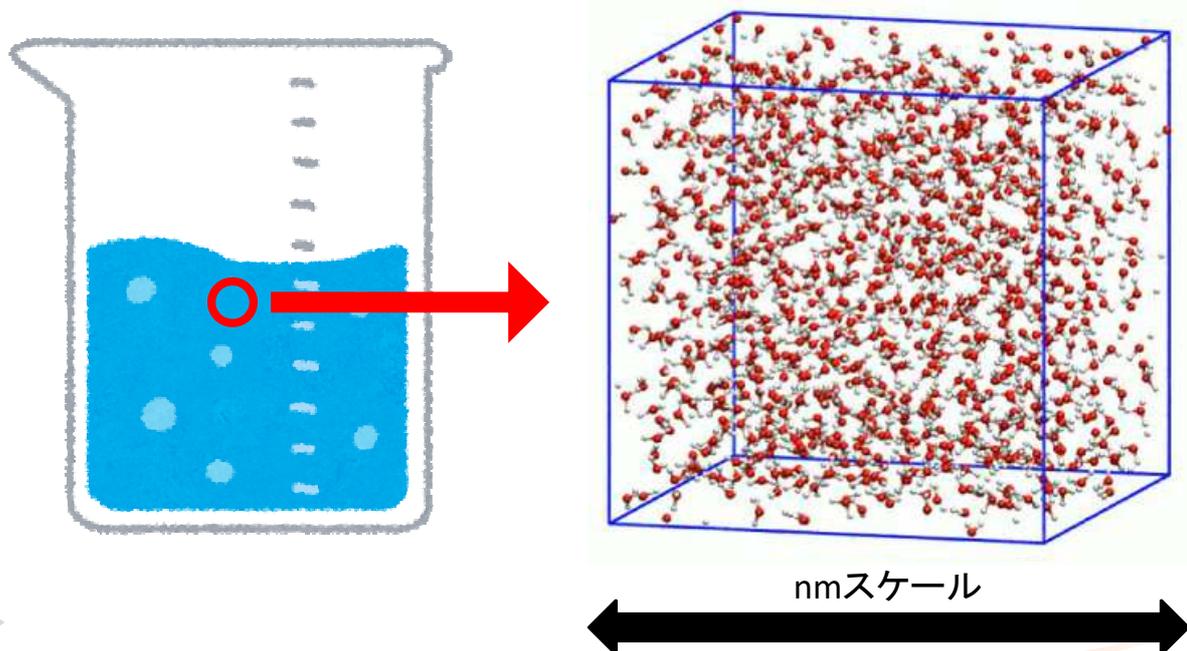
# 分子動力学計算とは

## ➤ 原子に関する運動方程式を解く計算



# 分子動力学計算とは

➤ 微小な領域で原子集団を運動させる計算

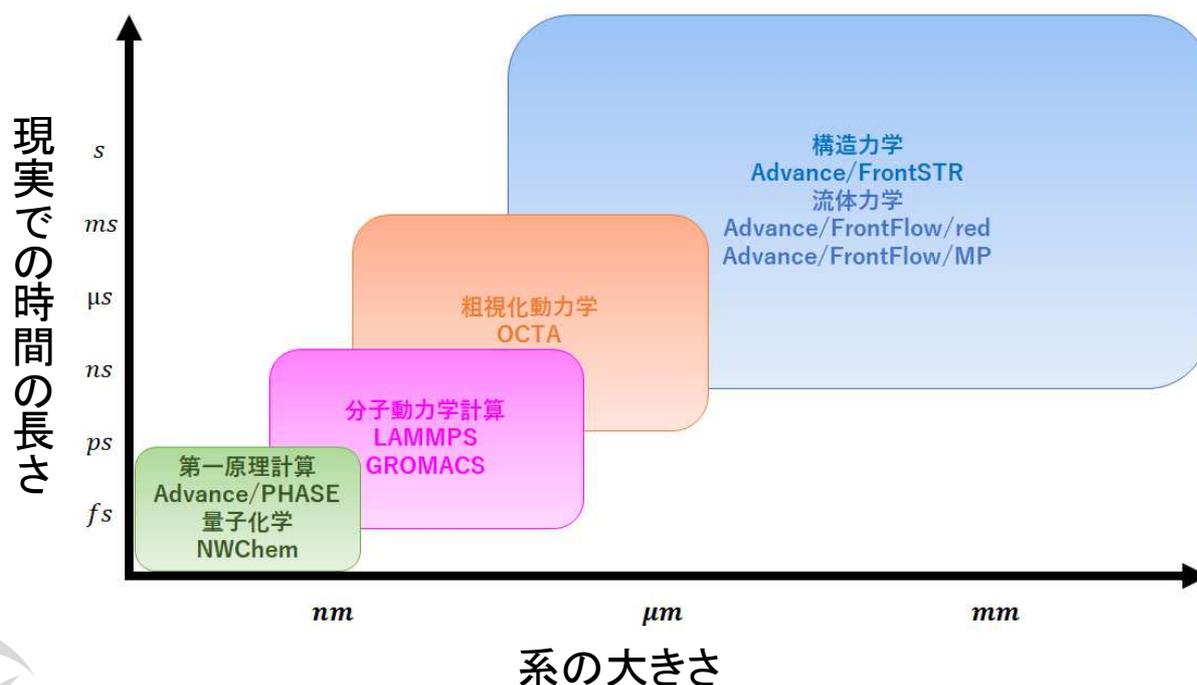


# 分子動力学計算からわかること

➤ 原子集団の動きや構造変化、物性値

- 粒子の拡散、固体の研削、分子の吸着、化学反応  
⇒原子集団がどのように動くか
- 剥離現象、沸騰・凝固等の相変化、架橋反応、亀裂形成  
⇒構造がどのように変化するか
- 輸送係数、弾性率、摩擦係数、表面張力  
⇒動きや構造の変化をモデル式に落とし込む

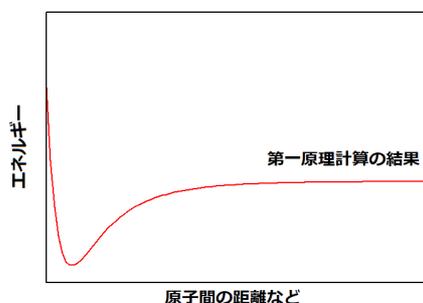
# 分子動力学計算の主な適用範囲



## 分子動力学の適用に関して

### ➤ 原子・分子スケール(数万～数十万原子)

- 第一原理・量子化学計算よりは大きな系を扱うことが可能  
⇒ 第一原理等からエネルギーの関係を単純な式に  
落とし込むことで相互作用を単純化して計算が可能

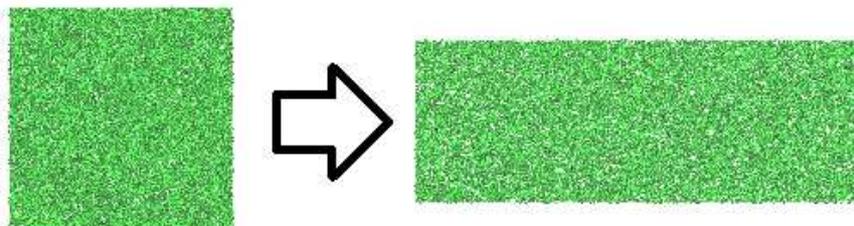


調和振動子:  $k(r - r_0)^2$   
LJ:  $\epsilon[(\sigma/r)^{-12} - (\sigma/r)^{-6}]$   
などの関数(相互作用の式)に射影

- 流体計算や構造計算よりは小さい系を扱う  
⇒ 流体計算や構造計算のためのパラメータの計算が可能  
ex) 拡散係数等の輸送係数、ヤング率等の弾性率

# LAMMPSの良い点

- WindowsでもLinuxでも利用可能
- 様々な相の計算が可能(結晶や溶液や界面...etc)
- 多機能であるため複雑な解析にも対応可能



(例)材料を引っ張った時に伸びが生じる様子



(例)材料を引っ張った時に割れる様子

# LAMMPSの良くない点

- マニュアルの時点で難しいと言われる
- チュートリアルが不足している
- まともなGUIが少ない

マニュアル約2000頁(英語)  
サンプルのモデルが非常に基礎的  
基礎原理の理解  
計算モデルの理解

⇒弊社では

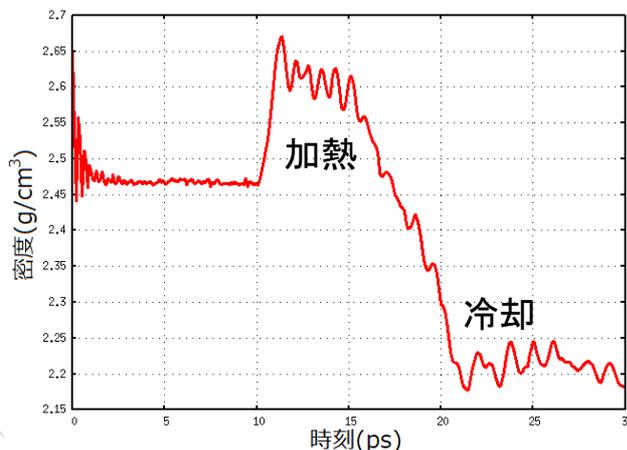
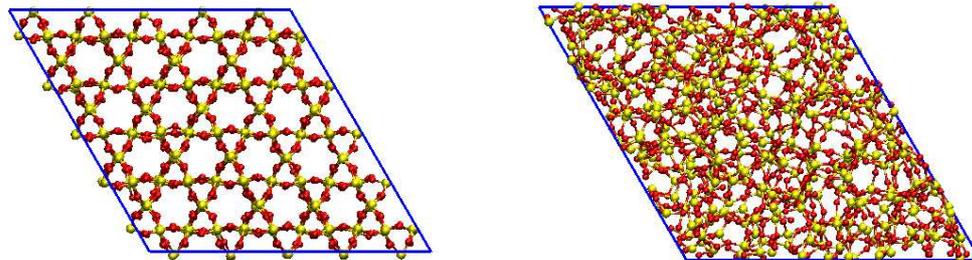
- テーマに合わせて受託解析を実施
- トレーニングや導入・利用サポートを実施
- コンサルティングの実施
- 使い勝手の良いGUIであるNanoLaboの販売

# 主な適用例

## ➤ 具体的にどのようなテーマが扱えるか

- アモルファス構造の作成
- 接着剤の接着強度や剥離現象
- 粘性係数等の輸送係数の計算
- 化学反応(樹脂の硬化)
- 強度解析
- 沸騰(冷却)現象
- 結晶成長
- 分子の吸着・侵入現象
- etc...etc...(原子分子レベルの解析一般)

## ① アモルファス構造の作成



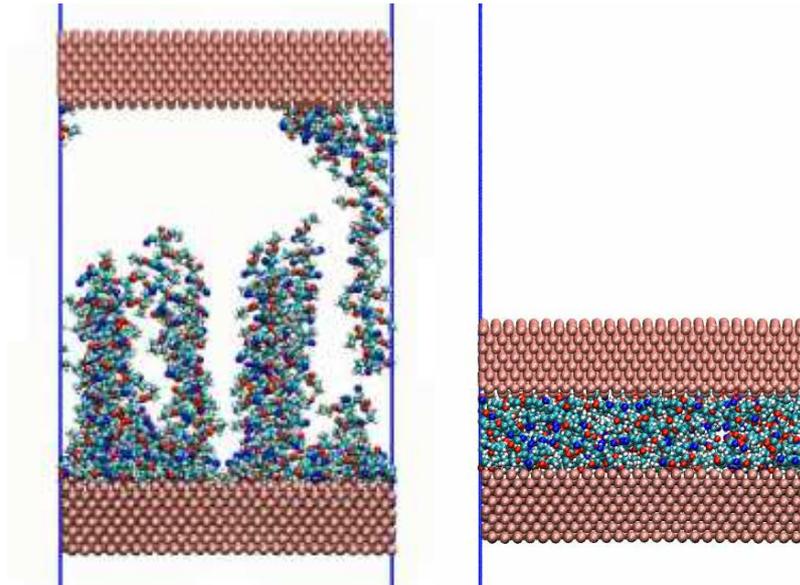
液状のガラスを急冷することで  
アモルファス構造が得られる



第一原理計算への転用や  
強度解析の実施など

## ②接着剤の接着強度や剥離現象

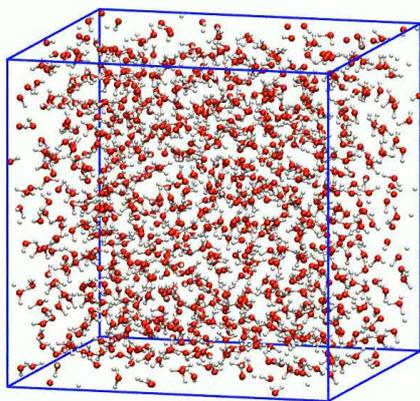
↑  
強い力で  
引っ張った  
場合



↑  
弱い力で  
引っ張った  
場合

剥離が生じる強度の解析や  
剥離メカニズムの解析に利用可能

## ③輸送係数の計算



一般的に、以下のような統計力学的な  
公式(一例)から輸送係数を求めることができる

$$\text{拡散係数} : D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \langle v(0) \cdot v(t) \rangle dt$$

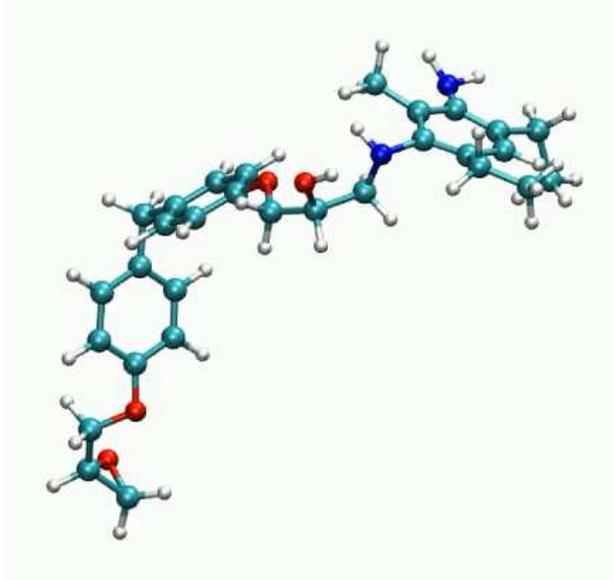
$$\text{熱伝導率} : \kappa = \frac{V}{3k_B T^2} \int_0^{\infty} \langle J(0) \cdot J(t) \rangle dt$$

$$\text{粘性係数} : \mu = \frac{1}{3Vk_B T} \int_0^{\infty} \langle \tau(0) \tau(t) \rangle dt$$

各時刻、各原子の速度や受けている応力が計算できるため  
上記のような公式を用いて輸送係数を計算可能

## ④化学反応(樹脂の硬化)

➤ 結合の組み換えにより架橋(ポリマーの形成)を再現



動的な効果を考慮した硬化現象

- 原子間の距離
- 反応確率
- 反応を起こす時間

未反応分子や重合度の違いを考慮した構造モデルの作成が可能

弊社で作成したプログラムと  
LAMMPSの既存機能を  
複合的に利用して実現可能

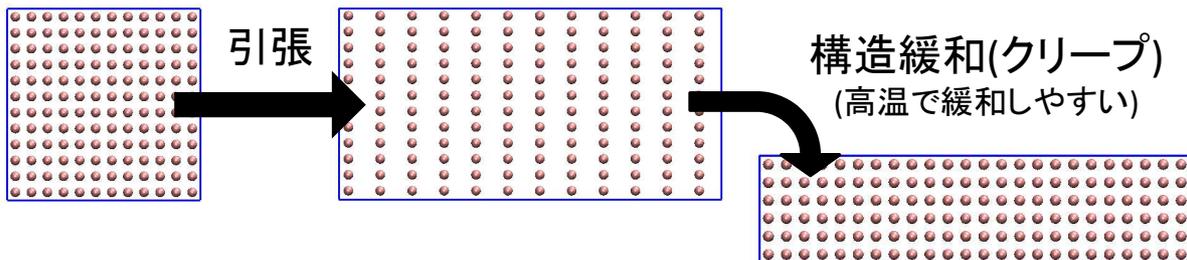
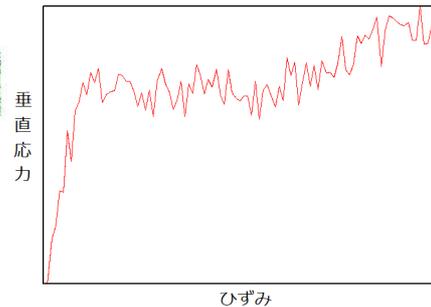
樹脂だけではなく固体表面の  
膜生成での構造作成などにご  
利用頂くことも可能です。

## ⑤強度解析

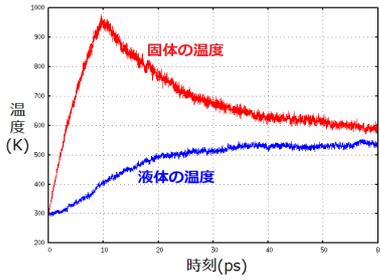
引張による構造の破壊も見られる



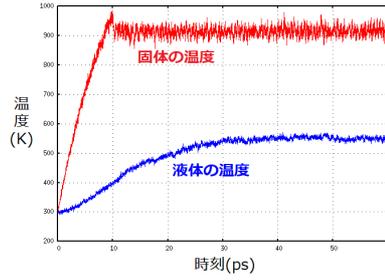
特定の長さまで伸ばしたときの  
応力やひずみの情報から  
ヤング率やポアソン比が得られる



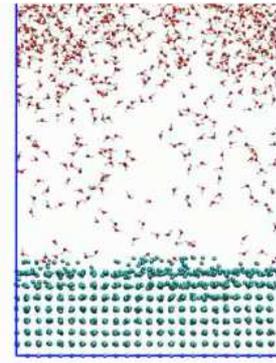
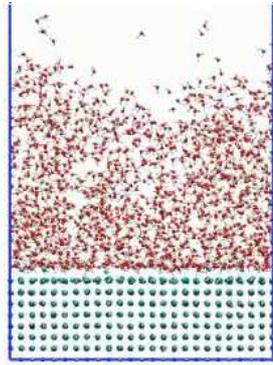
## ⑥ 沸騰(冷却)現象



短時間加熱した場合

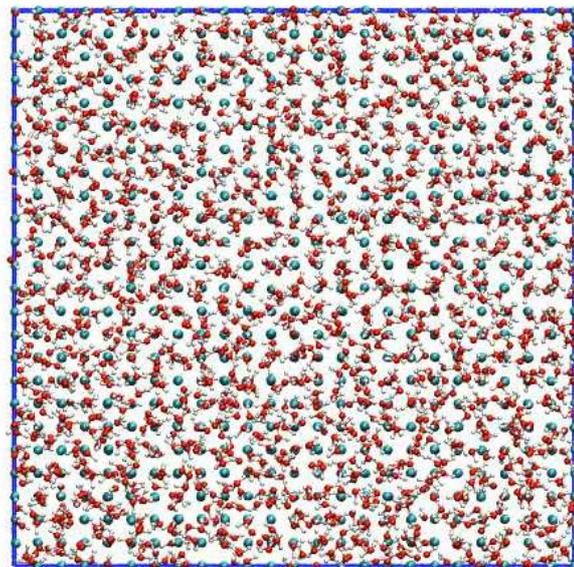
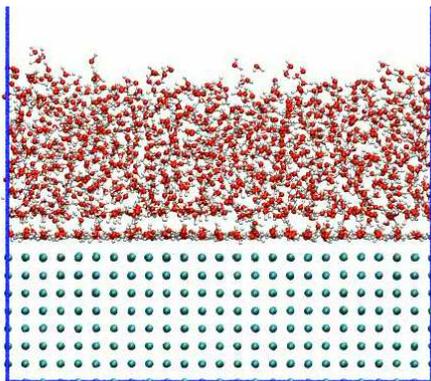
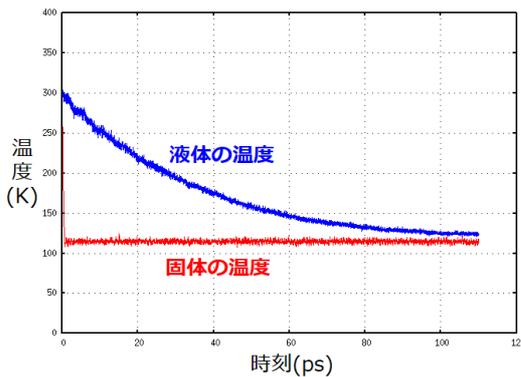


加熱し続けた場合



固体の温度に依存して  
液体の蒸発や  
膜沸騰が起こる

## ⑦ 結晶の成長



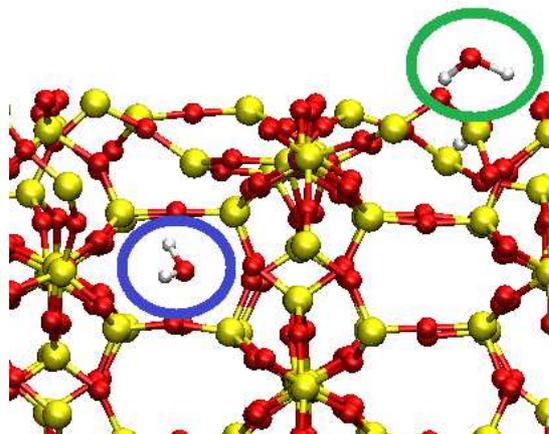
液体の冷却(運動量減少)による  
凝固した状態への遷移

## ⑧分子の吸着・侵入現象

小分子が固体表面に吸着したり、  
空孔領域を通過して侵入する



吸着の安定性や侵入パスの解析、  
浸透率の予測

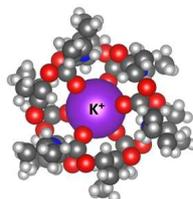


# ご清聴ありがとうございました。

ご検討中のテーマ等がございましたら  
計算可否に関わらずお気軽にお問い合わせください。

# 量子化学計算ソフトウェア NWChemによるサービスのご紹介

ナノシミュレーション研究開発センター 鈴木鉄兵



ナノ材料シミュレーションセミナー

～古典分子動力学、量子化学計算、第一原理計算、GUI～

2019年1月24日（木）

アドバンスソフト株式会社



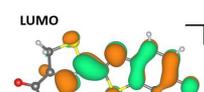
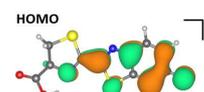
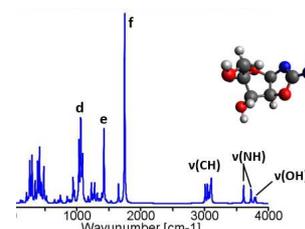
## Outline

### 1. 量子化学およびNWChemの概要(イントロ)

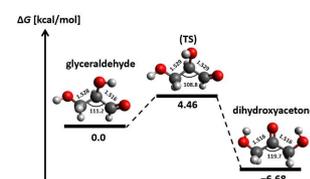
### 2. NWChemの計算事例

Structure optimization (Density-fitting method)  
Vibrational analysis (Calix[4]arene, heterocycles)  
Electronic structure & excited states (Luciferin)  
Thermochemistry  
Electron correlation theory

### 3. 解析サービスのご提案、質疑応答



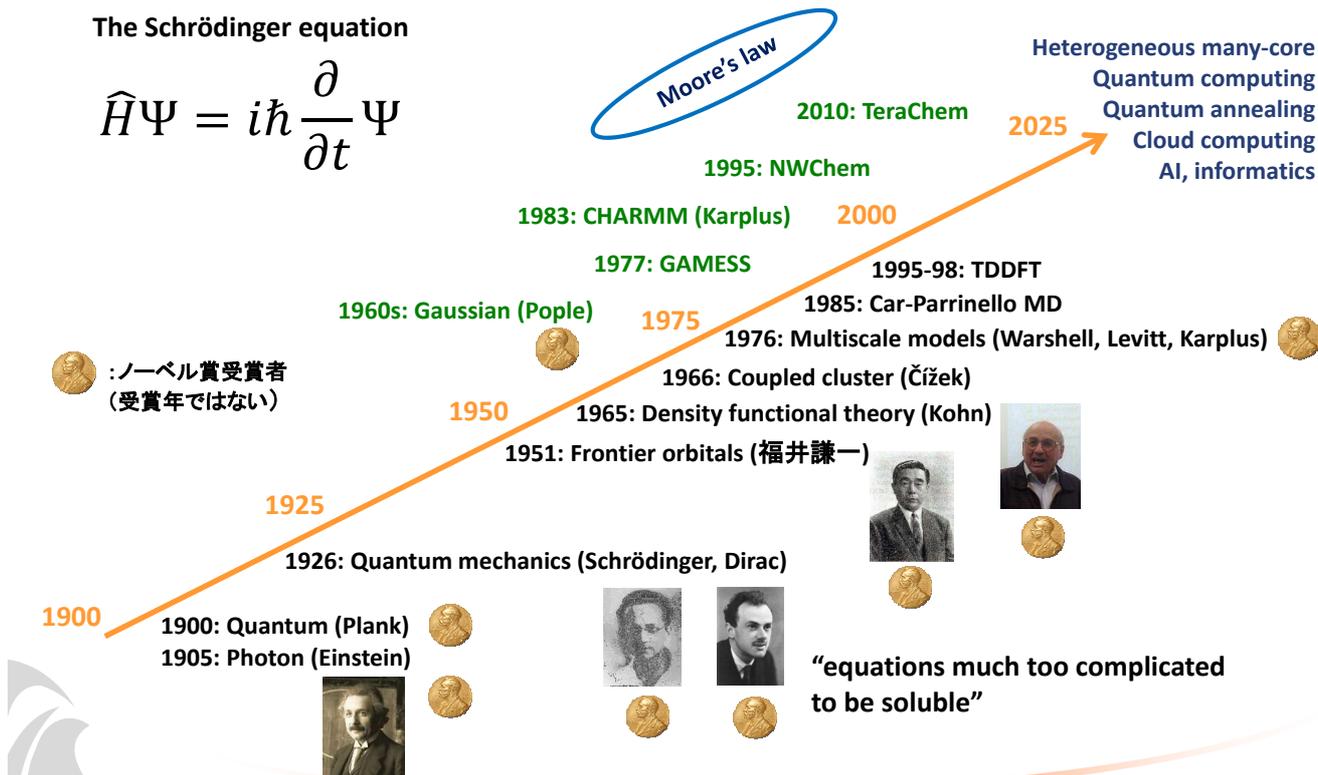
2.770 eV,  $f = 0.6020$



# Quantum Chemistry: Overview

The Schrödinger equation

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

3

# A comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations

米パシフィック・  
ノースウェスト国立研究所  
が開発元



Gaussian-based DFT/TDDFT

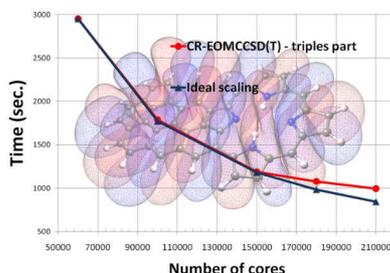
Plane-wave based DFT

High accuracy methods

Molecular dynamics,  
Molecular mechanics

QM/MM, ONIOM

Originally designed for massively  
parallel architectures



International collaboration



文献

[1] Valiev et al. *Comput. Phys. Commun.* 181 (2010) 1477-1489. [2] <http://www.nwchem-sw.org/>  
[3] <http://www.emsl.pnl.gov/>

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

4

## A: 座標

ここでは水分子のデカルト座標  
Z-Matrixも可能

## B: 基底関数

ここではcc-pVDZ基底系  
原子種ごとに基底関数を設定可能

## C: 手法

ここでは密度汎関数理論 (B3LYP)  
HF, MP2, CCSD(T), etc

## D: 計算内容

ここでは構造最適化と振動数計算

TASK	<理論>	<計算内容>
	scf	energy
	mp2	optimize
	tce	saddle
...		frequencies
		...

```

echo

start h2o
memory total 4000 mb

A geometry units bohr
H 0.0000000000000000 1.079252144093028 1.474611055780858
O 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
H 0.0000000000000000 1.079252144093028 -1.474611055780858
end

B basis
* library cc-pvdz
end

C dft
grid fine
xc b3lyp
mult 1
end

D task dft optimize
task dft frequencies
    
```



# Density-fitting method (Resolution of the identity)

量子化学計算のBottleneck:  
2電子反発積分(4-rank tensor)  
→メモリに格納することが困難

原子軌道の積を補助基底関数で展開:

$$\phi_{\mu}(\mathbf{r})\phi_{\nu}(\mathbf{r}) = \sum_P d_P^{\mu\nu} \chi_P(\mathbf{r})$$

2- and 3-rank tensorsへ  
→メモリに格納することが容易

cf.

Resolution of the identity (RI)

R12 methods

F12 methods

$(\mu\nu|\lambda\sigma)$  Four-index quantity

$$= \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\phi_{\mu}(\mathbf{r}_1)\phi_{\nu}(\mathbf{r}_1)\phi_{\lambda}(\mathbf{r}_2)\phi_{\sigma}(\mathbf{r}_2)}{r_{12}}$$



$(\mu\nu|\lambda\sigma)$  Two- and three-index quantities

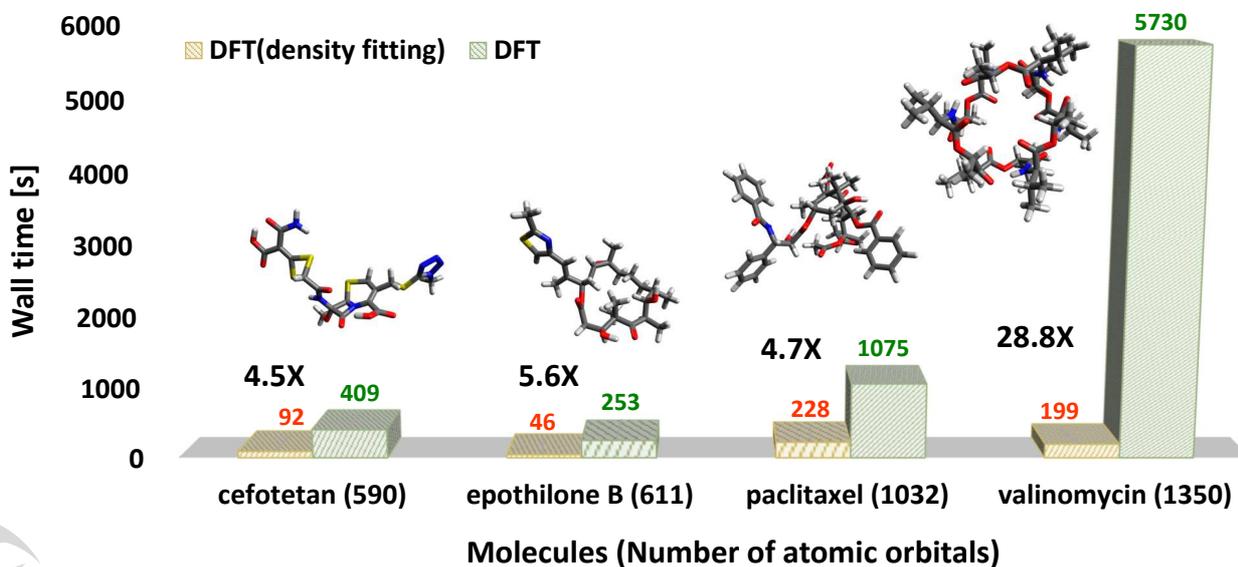
$$= \sum_{P,Q} \underbrace{(\mu\nu|P)}_{\text{2-index}} [J^{-1}]_{PQ} \underbrace{(Q|\lambda\sigma)}_{\text{3-index}}$$

where

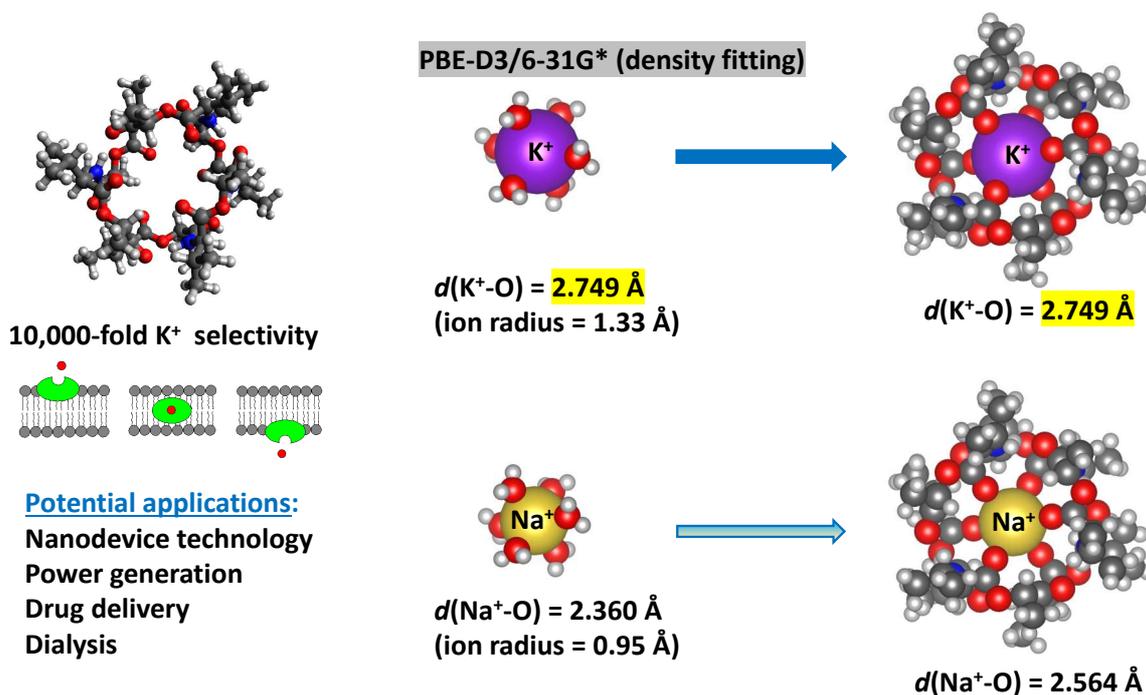
$$J_{PQ} = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\chi_P(\mathbf{r}_1)\chi_Q(\mathbf{r}_2)}{r_{12}}$$

# Density-fitting method: Speedup of 5 to 29X

Wall time for single-point calculation (PBE-D3/6-31G\*)



# Host-guest chemistry: Valinomycin (K<sup>+</sup> selectivity)



# Vibrational analysis: Calix[4]arene- $\text{Na}^+$

a:  $2628\text{ cm}^{-1}$



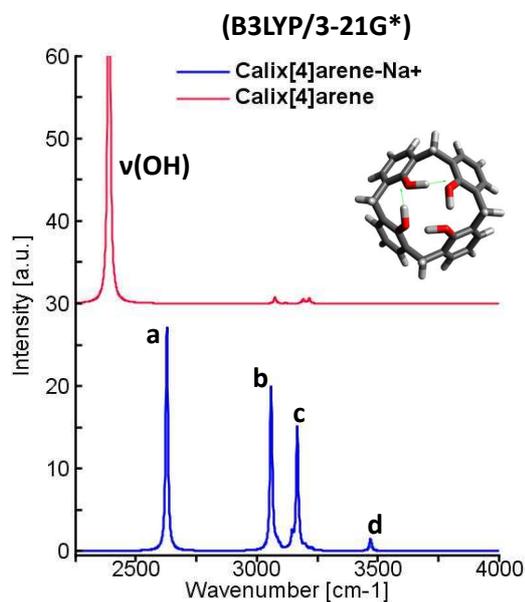
b:  $3059\text{ cm}^{-1}$



c:  $3167\text{ cm}^{-1}$

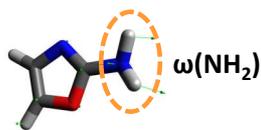


d:  $3469\text{ cm}^{-1}$

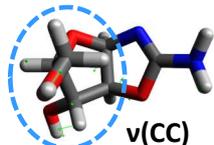


# Vibrational analysis: Heterocycles

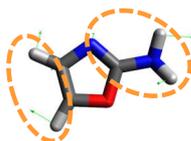
a:  $587\text{ cm}^{-1}$



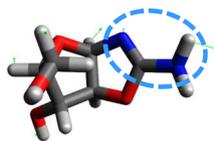
d:  $1057\text{ cm}^{-1}$



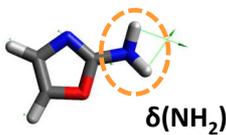
b:  $1445\text{ cm}^{-1}$



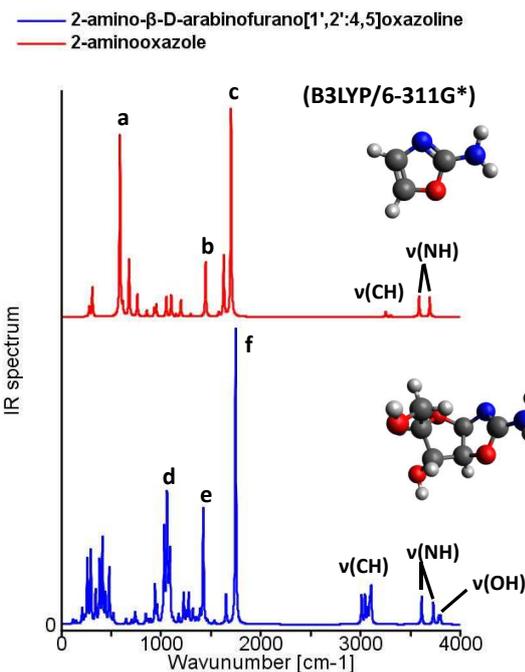
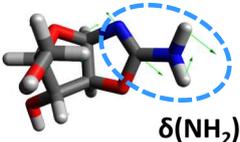
e:  $1422\text{ cm}^{-1}$  (-23)



c:  $1700\text{ cm}^{-1}$



f:  $1747\text{ cm}^{-1}$  (+47)



## Time-dependent Kohn-Sham equation

One of TDDFT methods:  
Casida Formulation (1996)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi_i(\mathbf{r}, t) = \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{\text{eff}}[\mathbf{r}, t; \rho(\mathbf{r}, t)] \right) \phi_i(\mathbf{r}, t)$$

Perturbed density  
→ first-order correction

where

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0(\mathbf{r}) + \delta\rho(\mathbf{r}, t)$$

$$V_{\text{eff}}[\mathbf{r}, t; \rho(\mathbf{r}, t)] = V_{\text{ext}}[\mathbf{r}, t] + \int d^3\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \boxed{\frac{\delta A_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r}, t)}}$$

Linear response approach  
→ frequency domain

$$\approx \frac{\delta E_{xc}[\rho_t]}{\delta \rho_t(\mathbf{r})}$$

Adiabatic approximation



$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^* & \mathbf{A}^* \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{bmatrix} = \omega \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{bmatrix}$$

R. E. Stratmann and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 109 (1998) 8218

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

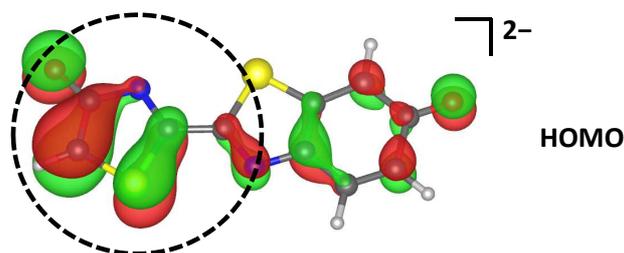
11

# Bioluminescence: Firefly luciferin

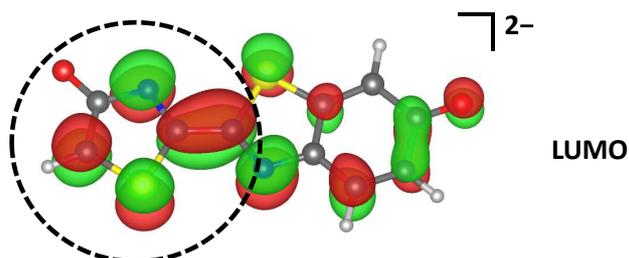


TDDFT//B3LYP/cc-pVDZ  
Excitation energy: 2.409 eV (515 nm)  
Total oscillator strength: 0.26516

Oxyluciferin (OxyL<sup>2-</sup>)

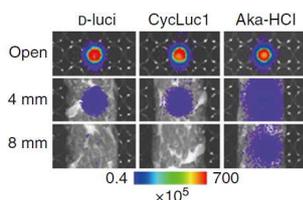


$\pi$ - $\pi^*$  transition

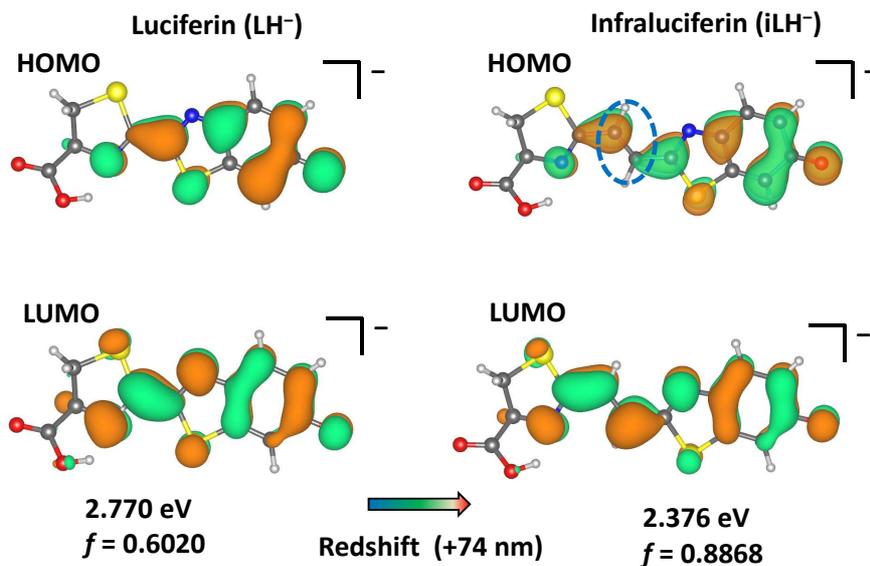


# Excitation energy: Firefly luciferin analogues

**Applications:**  
Bioluminescent maker  
Bio-imaging

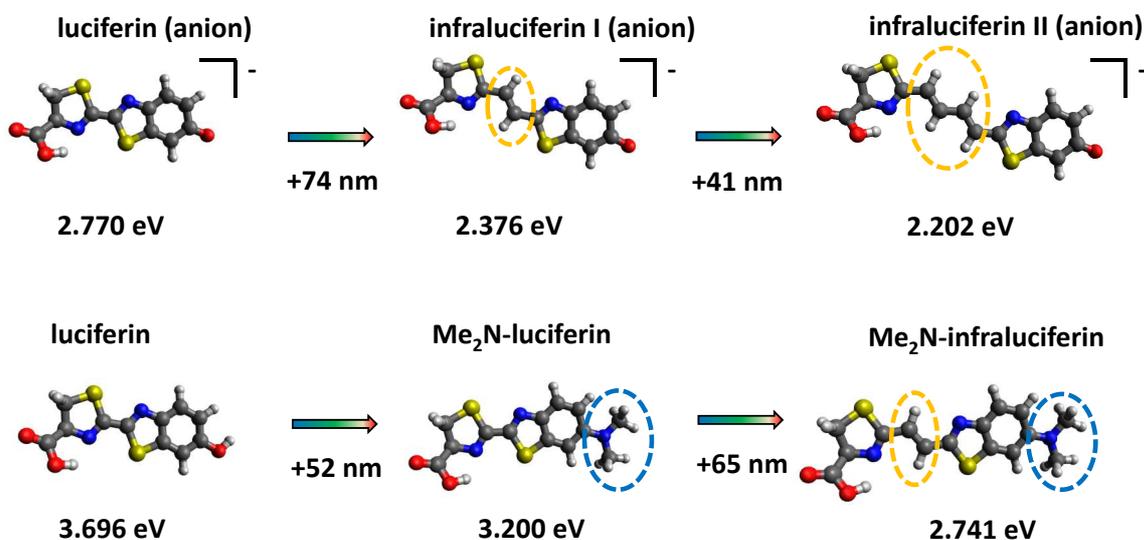


T. Kuchimaru et al.  
Nat. Commun. 7 (2016) 11856



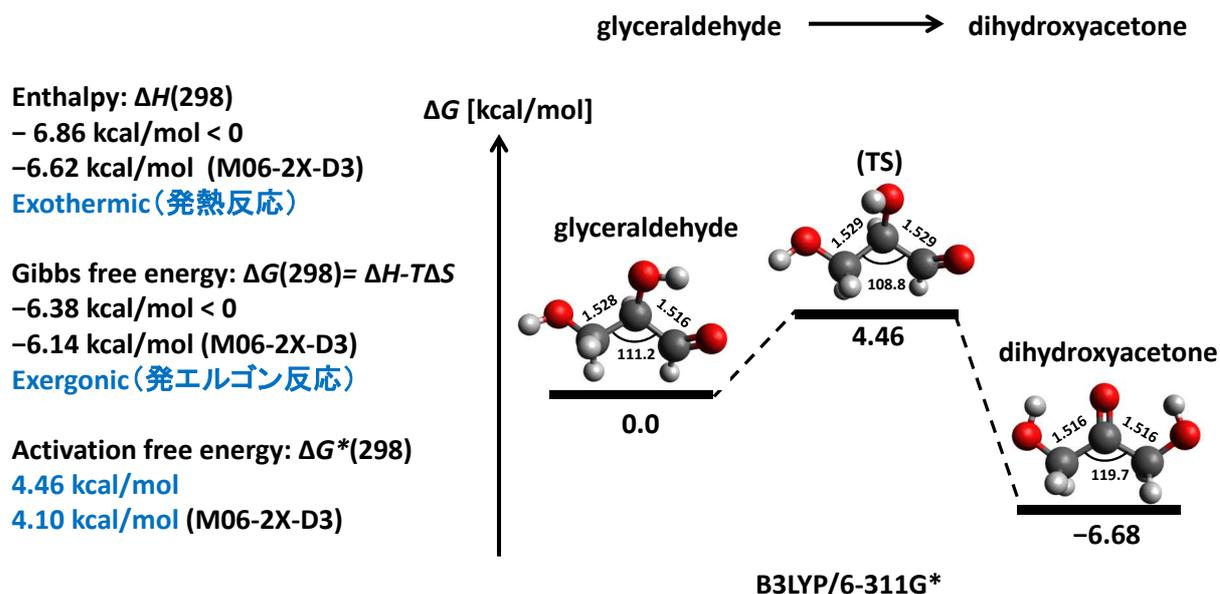
TDDFT: B3LYP/cc-pVDZ (singlet excitation)

# Designing molecules: Firefly luciferin analogues

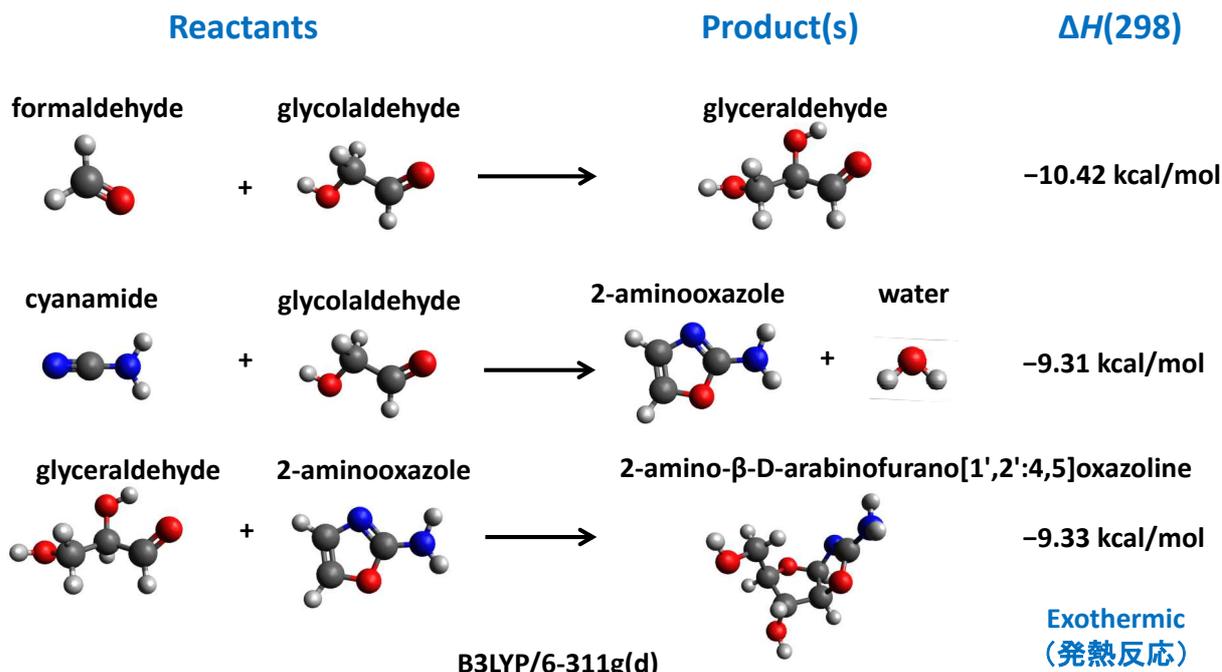


TDDFT: B3LYP/cc-pVDZ (singlet excitation)

# Thermochemistry: Transition state and activation energy

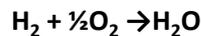


# Thermochemistry: Reaction enthalpy



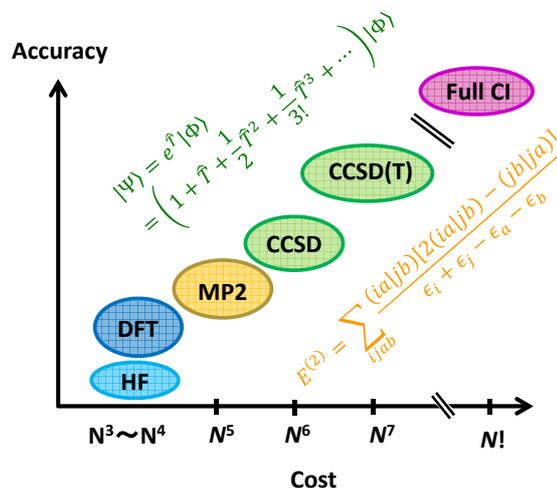
$$E_{\text{電子相関}} \equiv E_{\text{exact}} - E_{\text{Hartree-Fock}}$$

- $E_{\text{Hartree-Fock}}$ : 全エネルギーの99%以上
- 残りの約1%: 化学反応の再現に必要な精度



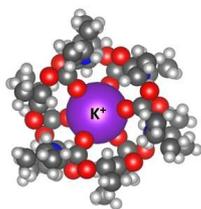
手法	水の標準生成 エンタルピー- $\Delta_f H$ [kJ/mol]	水の標準生成 エントロピー- $\Delta_f G$ [kJ/mol]
HF	-181.4 (60.4)	-168.8 (59.8)
B3LYP	-220.7 (21.1)	-209.0 (19.6)
M06-2X	-234.8 (7.0)	-223.0 (5.5)
MP2	-249.2 (-7.4)	-236.5 (-8.0)
CCSD(T)	-243.8 (-2.0)	-231.1 (-2.5)
Exptl	-241.8	-228.6

Basis set: cc-pVQZ

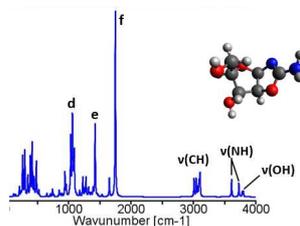


## Summary (applications)

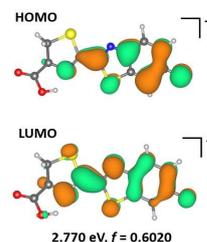
### Structure optimization



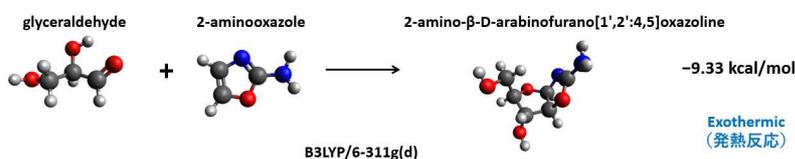
### Vibrational analysis



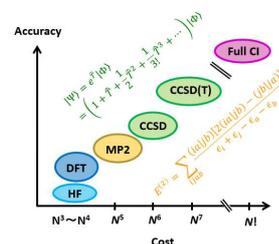
### Electronic structure, Excited states (TDDFT)



### Thermochemistry (Enthalpy, Gibbs free energy, activation energy)



### High accuracy methods



**受託解析:**  
解析モデルの設定、計算の実行、データの可視化、結果の解析等を行う

**コンサルティング:**  
計算化学を利用した研究開発に関する様々なご相談に対応する

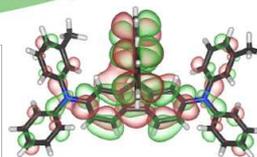
**利用サポート(Q&A):**  
NWChem(量子化学を中心とした)のサポートをE-mailで対応する

**トレーニング:**  
NWChemの講習を行い、学習を支援する

## 量子化学計算ソフトウェアNWChemを利用した解析サービス

### ～ NWChem\*とは～

計算化学の問題を効率的に扱うオープンソース (Educational Community License version 2.0.) の量子化学計算プログラムです。  
米バシフィック・ノースウェスト国立研究所の Environment Molecular Science Laboratory のコンソーシアムが開発元です。  
\* <http://www.nwchem-sw.org/>



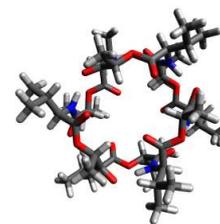
Spiro-TPD (有機 EL 材料) の最低非占有分子軌道

「合成した物質を理論的に調べたい」

「実験結果を説明したい」

「研究の指針が欲しい」

といった研究開発のさまざまな場面において、量子化学計算は実験と理論をつなぐ有用な道具となりつつあります。NWChemは、ハイパフォーマンス・コンピューティングによる量子化学計算によって、分子をはじめとするさまざまな物質について、原子・電子レベルの定量的な情報の取得を可能にします。



## 添付資料

「量子化学計算ソフトウェア NWChem  
によるサービスのご紹介」

分類	手法および機能
量子化学	ハートリー・フォック法(制限、非制限、制限開殻)、密度汎関数理論(DFT)(交換相関汎関数としてハイブリッド法、meta-GGA法、ファン・デル・ワールス補正などを含む)、時間依存DFT(TDDFT)、実時間TDDFT、結合クラスター法(CCS、CCSD(T)、EOM-CC等)、多体摂動論(MP2、RI-MP2など)、完全活性空間自己無撞着場(CASSCF)、相対論的全電子近似(Douglas-Kroll法、ZORA法)、QM/MM法、ONIOM法、Nudged Elastic Band(NEB)法、溶媒効果(COSMO、SMD、VEM、1D-RISM)、物性値計算(赤外・ラマンスペクトル、励起スペクトル、核磁気共鳴など)
その他	擬ポテンシャル平面波法による周期系のDFT計算、Car-Parrinello第一原理分子動力学計算、各種力場(AMBER、CHARMM等)を用いた古典分子動力学計算

For more information: [http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main\\_Page](http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main_Page)

## 主な量子化学計算ソフトウェアとその特徴

主な量子化学計算ソフトウェア				
ソフトウェア	創立年	ライセンス	言語	特徴
Gaussian	1960s	有償	Fortran	デファクトスタンダード、速い収束性、多機能
Molpro	1960s	有償	Fortran	密度フィッティング法、高精度計算、多参照理論
ADF	1970s	有償	Fortran	Slater型の基底関数、DFTに特化、相対論効果
GAMESS	1977	Academic	Fortran/C	HF法、DFT、MP2、多配置SCF法
Jaguar	1985	有償	Fortran/C++	擬スペクトル法、中規模の分子の高速計算
TURBOMOLE	1987	有償	Fortran	密度フィッティング法、GW法
Spartan	1991	有償	Fortran/C/C++	GUI・ソルバーの一体型ソフトウェア
ACES	1992	GPL	Fortran 77/C	多体摂動理論、結合クラスター法、並列計算性能
Q-Chem	1993	有償	Fortran/C++	多機能、電子相関理論、高速なDFT計算
NWChem	1995	ECL ver. 2.0	Fortran 77/C	並列計算性能、電子相関理論、励起状態計算
Dalton	1997	LGPL	Fortran 77/95	電子相関理論、多配置SCF法、線形スケーリング
MPQC	2002	GPL	C++	並列計算性能、HF法、DFT、電子相関理論
TeraChem	2010	有償	C/CUDA	GPUのアーキテクチャを最大限に活用
ORCA	2012	Academic	C++	並列計算性能、HF法、DFT、電子相関理論
Psi4	2012	LGPL	C++/Python	HF法、DFT、電子相関理論、多配置SCF法
SMASH	2014	Apache 2.0	Fortran 90/95	高速化、並列計算性能、HF法、DFT、MP2
PySCF	2014	Apache 2.0	Python	NumPyライブラリを利用、電子相関理論
Psi4NumPy	2017	BSD-3-clause	Python/C++	NumPyライブラリとPsi4プログラムの利用

# 発表者紹介(鈴木鉄兵)

AdvanceSoft

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

早稲田大学 理工学部 電気電子情報工学科卒業  
早稲田大学大学院 理工学研究科 生命理工学専攻 博士後期課程修了  
博士(工学)(早稲田大学)取得



- 早稲田大学 助手、客員講師(常勤)
- Car-Parrinello分子動力学シミュレーション:単糖の水和



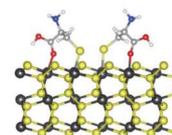
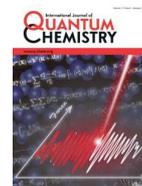
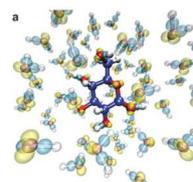
- NIMS, MANA ポスドク研究員
- O(N)DFTによる第一原理分子動力学、マテリアルズ・インフォマティクス



- 戒崎計算宇宙物理研究室 協力研究員
- Origin of life、表面科学、次世代計算機による数値計算(文献調査)



- 主事研究員
- 量子化学計算による受託解析業務など



## 主要文献

1. Suzuki, T., Yano, T., Hara, M., Ebisuzaki, T. Cysteine and cystine adsorption on FeS<sub>2</sub>(100). *Surf. Sci.* **674**:6–12 (2018).
2. Hirakawa, T., Suzuki, T., Bowler, D. R., Miyazaki, T. Canonical-ensemble extended Lagrangian Born–Oppenheimer molecular dynamics for the linear scaling density functional theory. *J. Phys.: Condens. Matter* **29**:405901 (2017).
3. Suzuki, T., Tamura, R., Miyazaki, T. Machine learning for quantum mechanical forces of solid systems through canonical ensemble. *Int. J. Quantum Chem.* **117**:3–39 (2017).
4. Suzuki, T. The hydration of glucose: the local configurations in sugar–water hydrogen bonds. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**:96–105 (2008).

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

23

# 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASEのご紹介

関西支店 岡崎 一行

ナノ材料シミュレーションセミナー  
2019年1月24日（木）  
アドバンスソフト株式会社

## 目次

- 第一原理計算とは
- Advance/PHASEとは
- 適用事例1
  - 固液界面のシミュレーション
- 適用事例2
  - 水素吸蔵材料のシミュレーション

# 目次

- 第一原理計算とは
- Advance/PHASEとは
- 適用事例1
  - 固液界面のシミュレーション
- 適用事例2
  - 水素吸蔵材料のシミュレーション



# 第一原理計算とは

- 実験結果などの**経験的なパラメータを用いず**に、物理学の第一原理に基づき、物質の性質を**電子・原子レベル**で精密に解析する方法
  - 物理学の第一原理
    - 古典力学          ニュートン方程式
    - 電磁気学          マクスウェル方程式
    - 統計力学
    - 量子力学          シュレディンガー方程式
- 計算機上で、物質の電子状態をシミュレーション



# 目次

- 第一原理計算とは
- Advance/PHASEとは
- 適用事例1
  - 固液界面のシミュレーション
- 適用事例2
  - 水素吸蔵材料のシミュレーション



# Advance/PHASEとは

- Advance/PHASEで用いる基礎理論
  - 密度汎関数理論
    - Hohenberg-Kohnの定理
    - Kohn-Sham方程式
  - 平面波基底
    - 周期境界条件
    - Blochの定理
  - 第一原理擬ポテンシャル法
    - ノルム保存型
    - ウルトラソフト



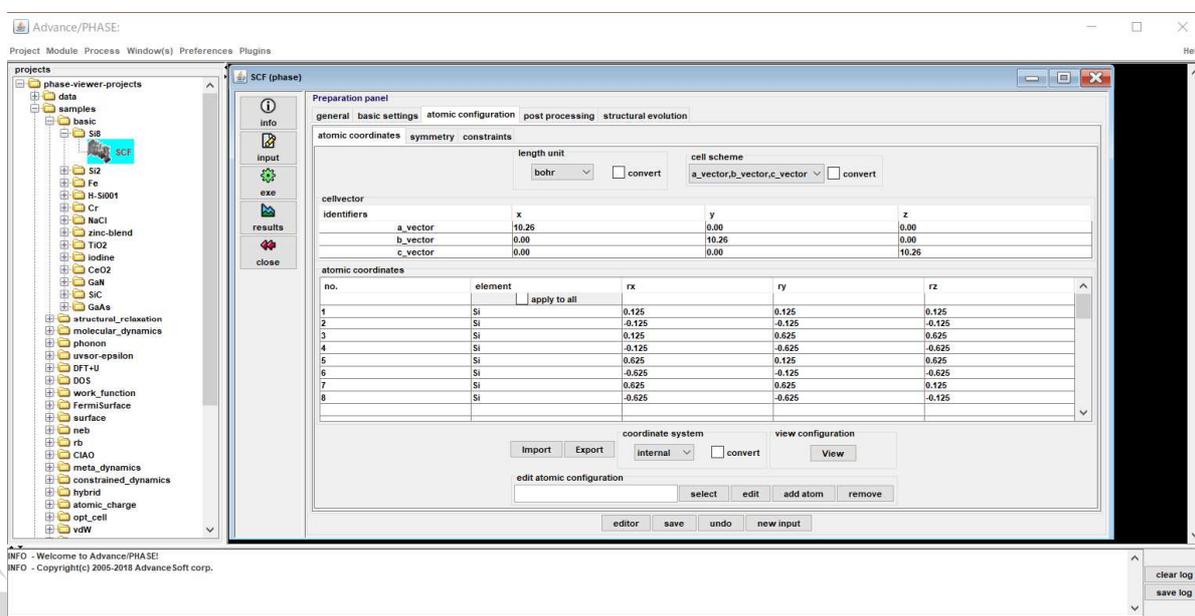
# Advance/PHASEとは

- 第一原理計算ソフトウェア
  - 計算ソルバー
    - phase : SCF計算などを行うメインエンジン
    - ekcal : 任意のk点での計算を行うエンジン  
SCF計算で求めた価電子密度を利用
    - epsmain : 光学応答を計算するエンジン  
SCF計算で求めた価電子密度を利用
  - グラフィカル・ユーザー・インターフェイス (GUI)
    - Phaseviewer付属
  - 現在は、Version 3.6



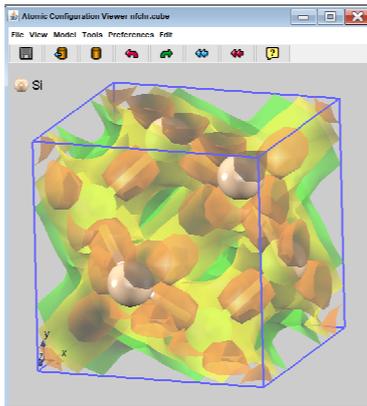
# Advance/PHASEとは

## GUI

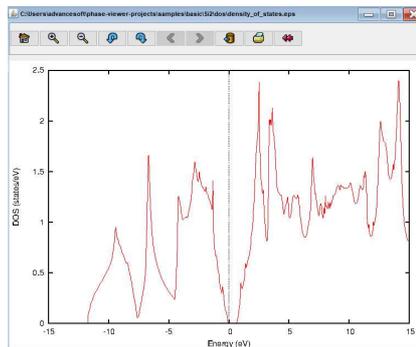


# 基本機能の出力例 GUI

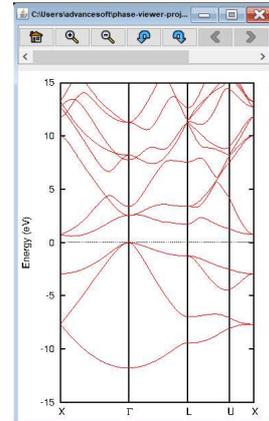
Si価電子密度分布



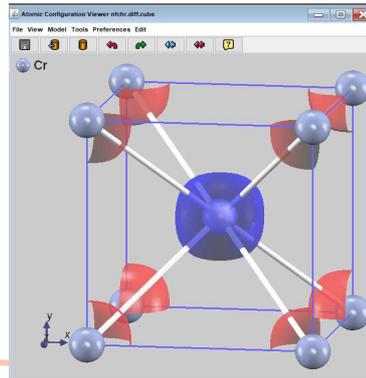
Si状態密度



Siバンド構造



Crスピン密度分布



## Advance/PHASEとは

- 適用範囲
  - 固体からソフトマテリアルまで
  - 固体
    - バルク(半導体、金属、磁性体など)
    - 表面(触媒、デバイスなど)
    - 界面(金属/半導体、分子/金属、有機物/金属など)
  - ソフトマテリアル
    - 高分子(エポキシ樹脂など)
    - 金属錯体(Metal-Organic Frameworkなど)
  - 周期境界条件の制約がある
    - 表面は真空を挟んだ周期スラブ
    - 界面も周期的に表れる
    - 孤立分子も一定距離だけ離れた周期性を持っている

# 目次

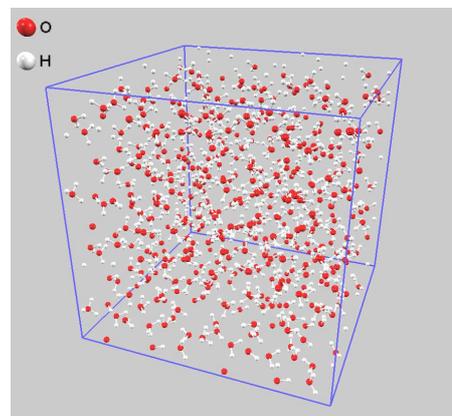
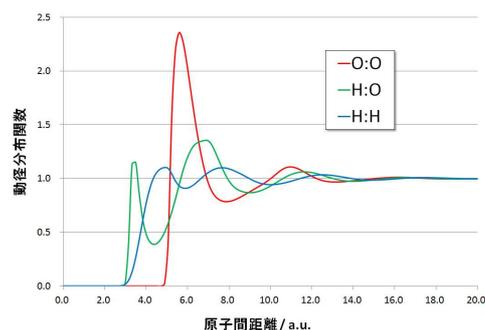
- 第一原理計算とは
- Advance/PHASEとは
- 適用事例1
  - 固液界面のシミュレーション
- 適用事例2
  - 水素吸蔵材料のシミュレーション

## 適用事例1

### 固液 (水-酸化物) 界面

- 溶媒(液体)は、分子の熱運動により一定の構造を取らない
  - 分子の揺らぎを統計力学的に取り扱う必要がある
  - 通常の第一原理計算が適用できない

水分子の動径分布



# 適用事例 1

## 固液 (水-酸化物) 界面

- 3D-RISM-SCF法  
H. Sato, et al : J. Chem. Phys. 112, 9463 (2000).
- 溶液論(3D-RISM) と 第一原理計算(SCF) を同時に解く。  
→ 溶媒の高精度な取り扱いが可能  
→ 多くの情報が得られる



# 適用事例 1

## 固液 (水-酸化物) 界面

- 固/液界面
  - 電気分解、Liイオン電池や燃料電池の電極反応、光触媒反応などは固/液界面の状態が重要な支配因子
- 水/TiO<sub>2</sub>界面を例に
  - TiO<sub>2</sub>:光触媒の一つ  
表面で、ヒドロキシルラジカル(OH\*)の生成??
  - 水/TiO<sub>2</sub>界面の研究は必要
    - 水(液体のH<sub>2</sub>Oをどのように扱うか?)



# 適用事例 1

## 固液 (水-酸化物) 界面

- Phys. Rev. B 82, 161415R (2010).
  - 熱揺らぎがある液体を扱うためには、第一原理分子動力学法を用いて、長時間シミュレーションを行い、統計処理する

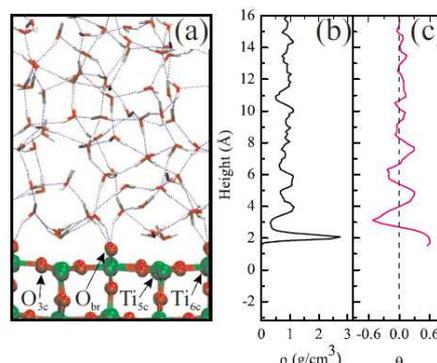
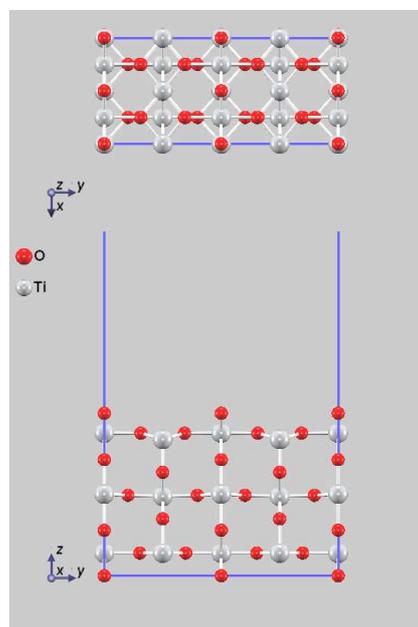


FIG. 2. (Color online) (a) Part of the simulation cell for the AIMD simulations of the liquid water/TiO<sub>2</sub> interface. Red/gray, green, and white spheres represent O, Ti, and H atoms, respectively. Red/gray and white sticks represent O and H atoms of water molecules, respectively; (b) mass density ( $\rho$ ) versus height for the water film on a four-layer TiO<sub>2</sub> slab. (c) Water dipole orientational order parameter ( $\theta$ ) along the  $z$  axis. In (b) and (c) the average position of the TiO<sub>2</sub> surface layer [the layer containing the Ti<sub>5c</sub>, the sixfold coordinated Ti (Ti<sub>6c</sub>), and threefold coordinated oxygen (O<sub>3c</sub>) atoms] is defined as zero.

# 適用事例 1

## 固液 (水-酸化物) 界面

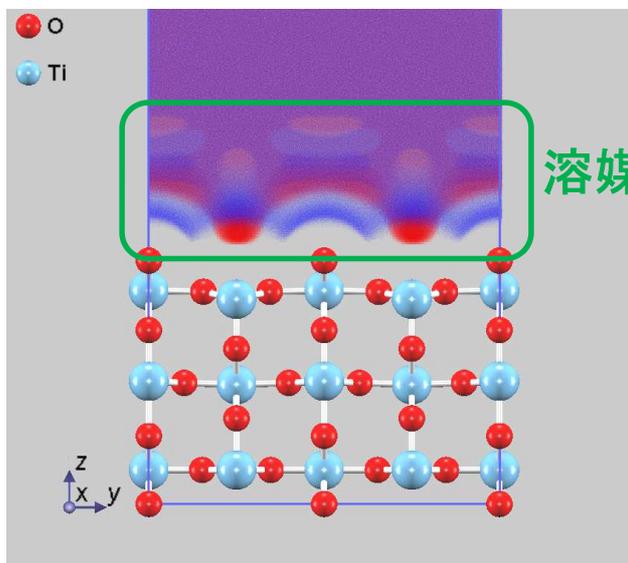
- Advance/PHASE
  - 密度汎関数理論
    - 交換・相関エネルギー汎関数 PBE
  - 平面波基底
    - 波動関数 18.75 Hartree
    - 電子密度 168.75 Hartree
  - サンプリングk点
    - 4 × 2 × 1 一様メッシュ
  - 擬ポテンシャル法
    - ウルトラスフト型
  - 3D-RISM
    - H<sub>2</sub>O: SPC/E model, 300 K
  - Rutile-TiO<sub>2</sub> (r-TiO<sub>2</sub>) (1 1 0)表面



# 適用事例 1

## 固液 (水-酸化物) 界面

- 溶媒和エネルギー 2.58 eV = 59.52 kJ/mol
- 水/TiO<sub>2</sub>(1 1 0)界面の構造



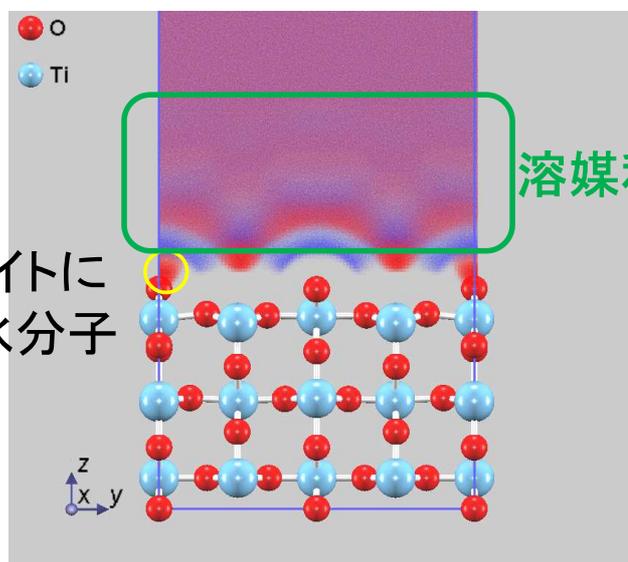
溶媒和構造が見られる

青: 水素原子の分布  
赤: 酸素原子の分布

# 適用事例 1

## 固液 (水-酸化物) 界面

- 溶媒和エネルギー 2.91 eV = 67.02 kJ/mol
  - 表面に酸素欠陥がある方が濡れやすい(親水性??)



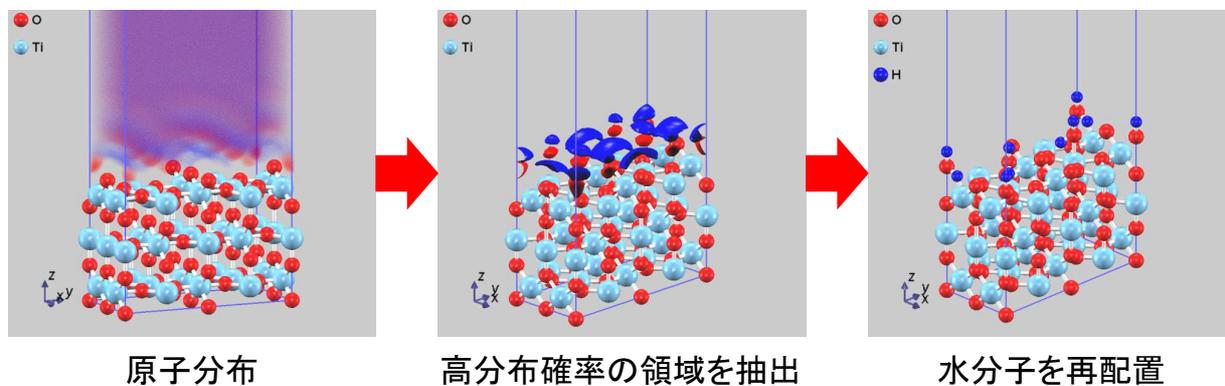
溶媒和構造が見られる

酸素欠陥サイトに  
入り込んだ水分子  
の酸素原子

青: 水素原子の分布  
赤: 酸素原子の分布

# 次のステップへ

- 表面反応を扱うには  
→表面にある水分子は量子力学的に取り扱う必要がある



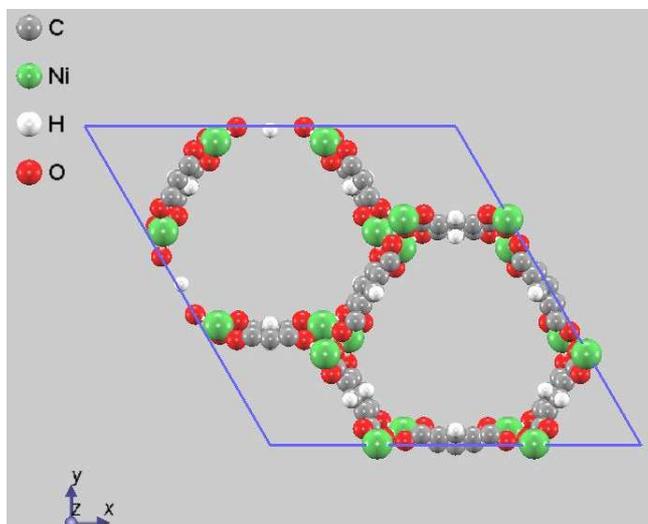
# 目次

- 第一原理計算とは
- Advance/PHASEとは
- 適用事例1
  - 固液界面のシミュレーション
- 適用事例2
  - 水素吸蔵材料のシミュレーション

# 解析事例2

## Metal-Organic-Frameworkへの水素吸蔵

- $\text{Ni}_2(\text{m-dobdc})$



a [nm]	2.5797
b [nm]	2.5797
c [nm]	0.6792
$\alpha$ [°]	90
$\beta$ [°]	90
$\gamma$ [°]	120

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

# 解析事例2

## Metal-Organic-Frameworkへの水素吸蔵

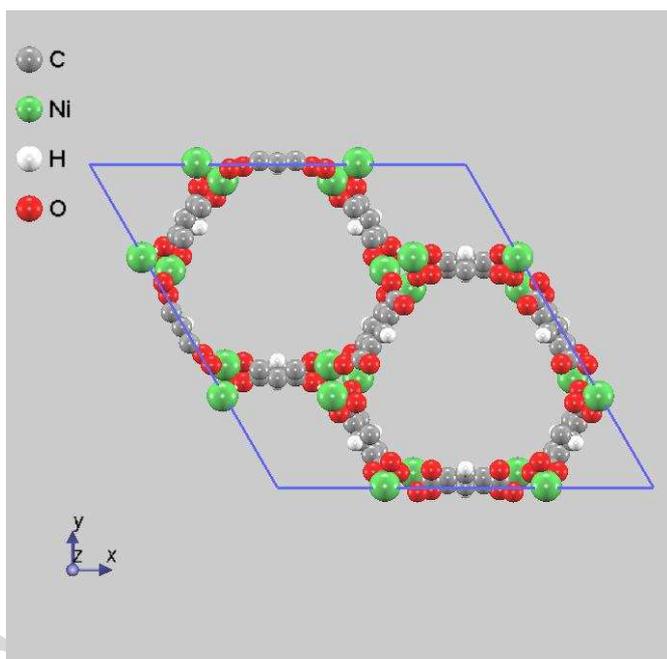
### 計算条件

平面波基底のカットオフエネルギー [Hartree]	波動関数	12.5
	電荷密度	112.5
サンプリングk点		2 × 2 × 4 一様メッシュ
収束条件	SCF	1.0 × 10 <sup>-8</sup> [Hartree/atom]
	原子位置の最適化	1.0 × 10 <sup>-3</sup> [Hartree/Bohr]
交換・相関エネルギー汎関数		一般化勾配近似 PBE汎関数
van der Waals補正		DFT-D3

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

## 解析事例2

### Metal-Organic-Frameworkへの水素吸蔵

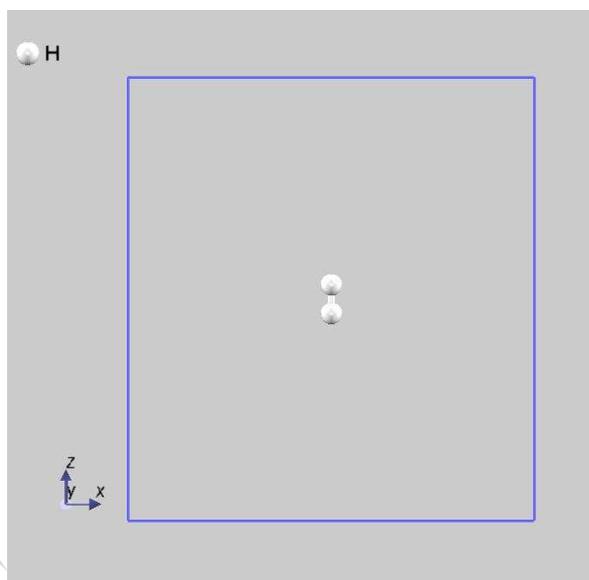


全エネルギー  
-1997.2637752951 [Ha]

## 解析事例2

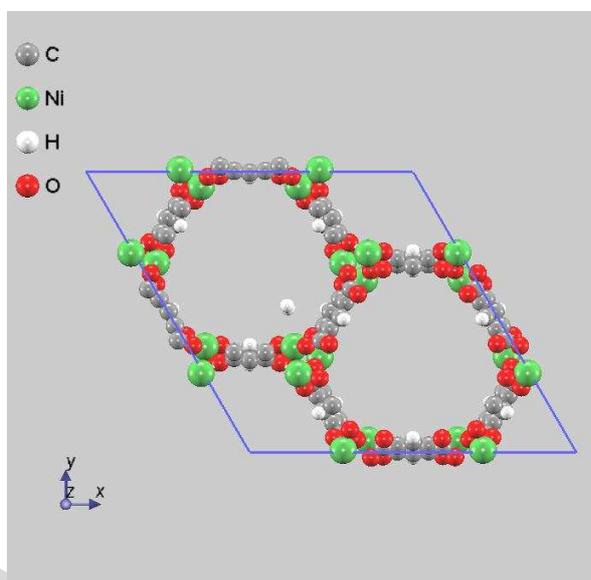
### Metal-Organic-Frameworkへの水素吸蔵

#### 水素分子



- 全エネルギー  
-1.1583891851 [Ha]
- 原子間距離  
0.075 [nm]

# 水素分子吸着



- 1つのオープンメタルサイトに水素分子を吸着
- ユニットセルのまま計算しているため、c軸方向には周期的に吸着している。
- 全エネルギー  
-1998.4367045187 [Ha]

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

## 解析事例2

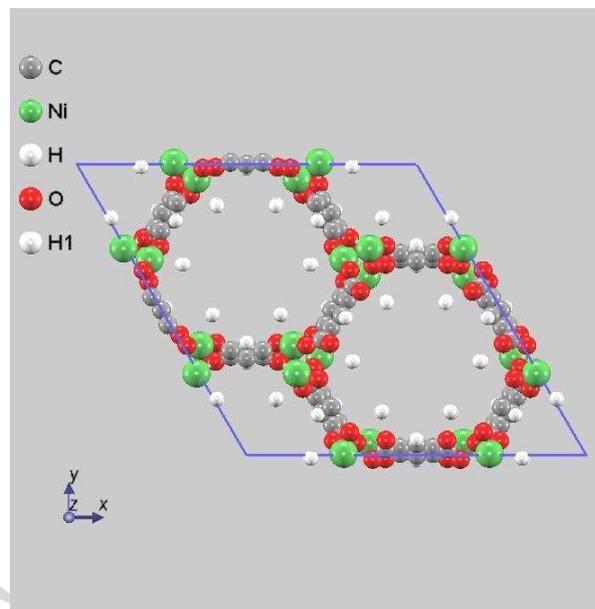
### Metal-Organic-Frameworkへの水素吸蔵

- 吸蔵エネルギー
  - 吸蔵エネルギーの定義
$$E_{\text{ad}} = E_{\text{H}_2/\text{MOF}} - (E_{\text{MOF}} + E_{\text{H}_2})$$
  - 計算により求められた $E_{\text{ad}}$   
-0.40 [eV] = -38.16 [kJ/mol]
  - すべてのオープンメタルサイトに水素分子が吸着した場合  
 $E_{\text{ad}} = -12.93$  [kJ/mol]の報告  
J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 12119-12129

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

# 解析事例2

## Metal-Organic-Frameworkへの水素吸蔵



- 18個のオープンメタルサイトにH<sub>2</sub>分子が吸着
- 全エネルギー  
-2018.1937976574 [Ha]

# 解析事例2

## Metal-Organic-Frameworkへの水素吸蔵

- 吸蔵エネルギー
  - 吸蔵エネルギーの定義
$$E_{ad} = \{E_{18H_2/MOF} - (E_{MOF} + 18E_{H_2})\}/18$$
  - 計算により求められた $E_{ad}$   
-0.12 [eV] = -11.53 [kJ/mol]
  - $E_{ad}$  = -12.93 [kJ/mol]の報告に近い値  
J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 12119-12129

新製品のご紹介

# ナノ材料解析統合GUI Advance/NanoLabo

材料システム開発室 西原 慧径

ナノ材料シミュレーションセミナー  
～古典分子動力学、量子化学計算、第一原理計算、GUI～  
2019年1月24日（木）  
アドバンスソフト株式会社



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

1

## Advance/NanoLabo

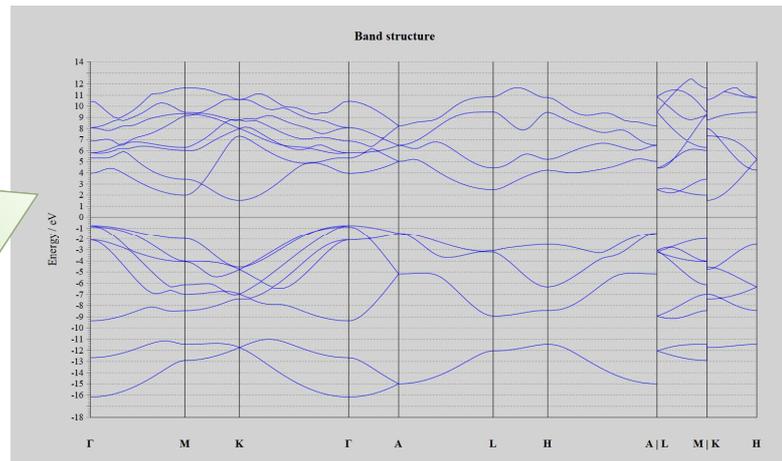
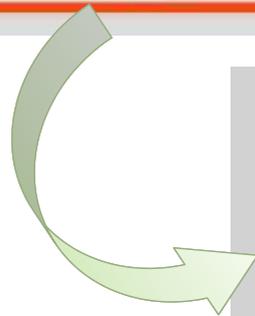
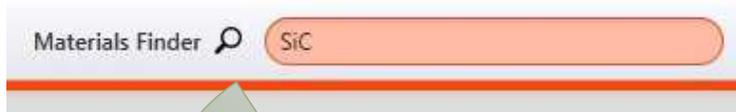
- ✓ 第一原理と分子動力学のシミュレーションを行うための、モデリング、計算実行、計算結果の可視化を統合したGUIシステム。
- ✓ ユーザーの行うべき作業を極限まで最小化。  
→ **化学式を入力するだけでバンド計算ができます。**



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

2

# 化学式 → バンド構造



# 主な機能

1. モデリング
2. 計算実行
3. 計算結果の可視化

# 1. モデリング

- 材料データベース検索
  - Materials Project (無機結晶) <<https://materialsproject.org>>
  - PubChem (分子) <<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>>
- モデルの加工
  - セル平行移動
  - スーパーセル
  - 不純物置換モデル
  - 格子欠陥モデル
  - 表面モデル
  - 有機分子の描画
  - 表面への小分子吸着モデル
  - 溶媒分子充填
  - Primitive Cell ⇔ Standard Cell
  - 空間群の判定

# 2. 計算実行

- 計算エンジン
  - Advance/PHASE (当社製品)
  - Quantum ESPRESSO (オープンソース、第一原理)  
<<https://www.quantum-espresso.org>>
  - LAMMPS (オープンソース、分子動力学)  
<https://lammps.sandia.gov>
- 計算機能  
SCF計算、構造最適化、バンド構造、状態密度、  
第一原理MD、古典MD、TD-DFT、Phonon など
- リソース
  - ローカルマシンでのジョブ実行 (Windows10, CentOS, macOS)
  - 計算サーバーへのジョブ投入 (SSH接続)

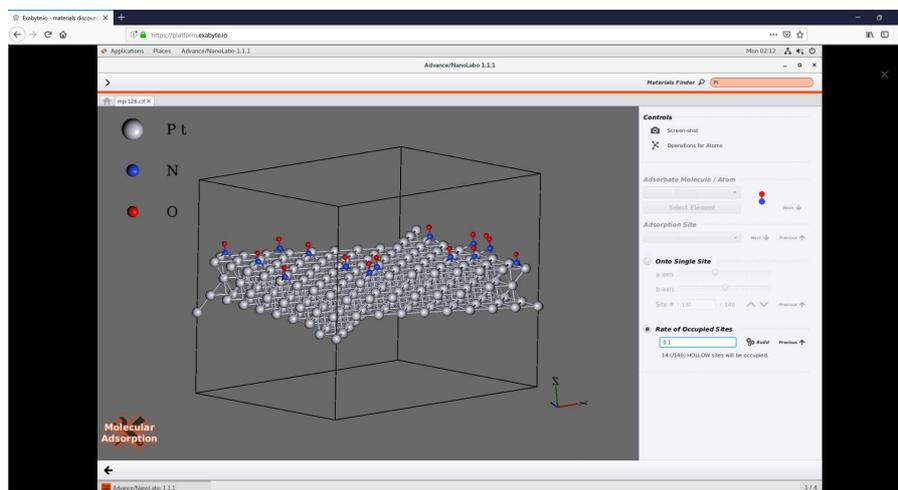
### 3. 計算結果の可視化

- ログファイル表示
- 収束状況チェック
- 構造の動画表示（構造最適化、分子動力学）
- バンド構造
- 状態密度
- 各種スペクトル表示 など



### NanoLabo on Cloud

- Exabyte社<<https://exabyte.io>>の提供するクラウド上にて、NanoLaboが利用可能
- クラウド上の計算リソースにジョブ投入
- ユーザーは、Webブラウザ上で全ての操作を行う。



# 価格および関連サービスのご紹介

営業部 営業第4課 東田 想太

ナノ材料シミュレーションセミナー  
～古典分子動力学、量子化学計算、第一原理計算、GUI～  
2019年01月24日（木）  
アドバンスソフト株式会社

# 受託開発、受託解析サービス

お客様の要望にお応えします！

## プログラム開発の受託

- ・市販品では対応できない新規解析プログラムの作成
- ・既存プログラムへの機能追加、高機能化
- ・既存プログラムの並列処理による高速化
- ・既存ソルバーのグラフィカルユーザーインターフェース(GUI)の作成
- ・複数のソフトウェアの計算自動化

## 解析計算の受託

- ・Advance/PHASEによる第一原理計算
- ・フリーソフト(QuantumESPRESSOやLAMMPS、NWChem)を使用した解析
- ・解析計算にかかるモデルファイルの作成
- ・擬ポテンシャルの作成

## 調査の受託

- ・先進的な解析手法の調査と分析

受託サービスの流れ



1. ナノ・バイオ分野で、ソフトウェア開発・解析経験豊富な技術者がお客様の要望をお伺い致します

2. 最適な開発手順、解析方法をご提案し、見積仕様書として作成致します

3. 開発・解析内容、納期、料金等、お客様のご了承が得られましたら、作業を実施致します

4. 解析結果の可視化をはじめ、評価や考察を行ない、報告書を作成致します







**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つ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。