

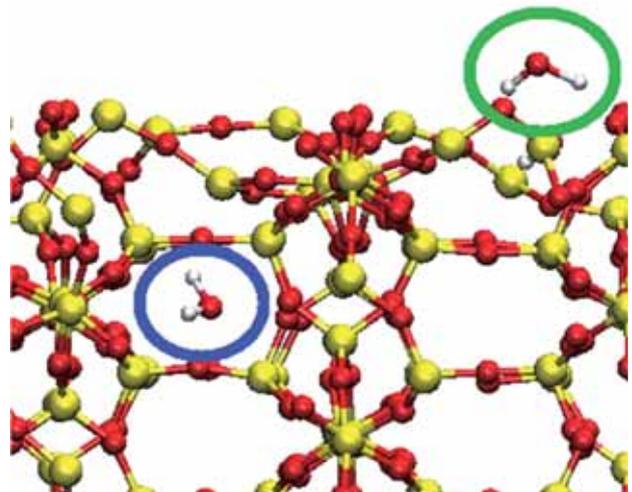
# ナノ材料シミュレーションセミナー

## ～古典分子動力学、実空間第一原理計算、第一原理計算、GUI～

2019年4月26日(金)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 主管技師長 岡崎 一行
13:25~13:55 (30分)	古典 MD 計算ソフトウェア LAMMPS <sup>†1</sup> によるサービスのご紹介 .....	5 研究員 田中 大地
13:55~14:25 (30分)	実空間第一原理計算ソフトウェア RSDFT のご紹介 .....	19 主管研究員 岩田 潤一
14:25~14:55 (30分)	第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE <sup>†2</sup> のご紹介 .....	33 主任研究員 胡 春平
14:55~15:05 (10分)	(休憩)	
15:05~16:05 (60分)	<b>特別講演</b> <b>「第一原理計算による結晶欠陥のナノ構造解析」</b>	※資料は非公開です 名古屋大学大学院 工学研究科 教授 松永 克志 様
16:05~16:35 (30分)	ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo のご紹介 .....	51 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 .....	55 ※資料は一部非公開です 営業部 田口 浩一
16:45	(閉会)	





# アドバンスソフト株式会社のご紹介

関西支店技術部 岡崎 一行

## ナノ材料シミュレーションセミナー

～古典分子動力学、実空間第一原理計算、第一原理計算、GUI～

2019年4月26日（金）

アドバンスソフト株式会社



## 会社概要

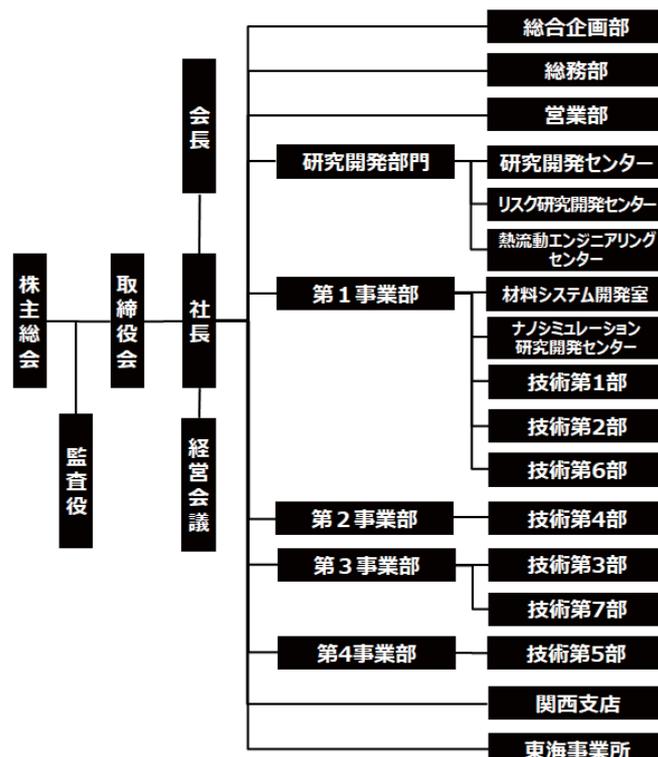
名称 アドバンスソフト株式会社  
(英文社名 AdvanceSoft Corporation)

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

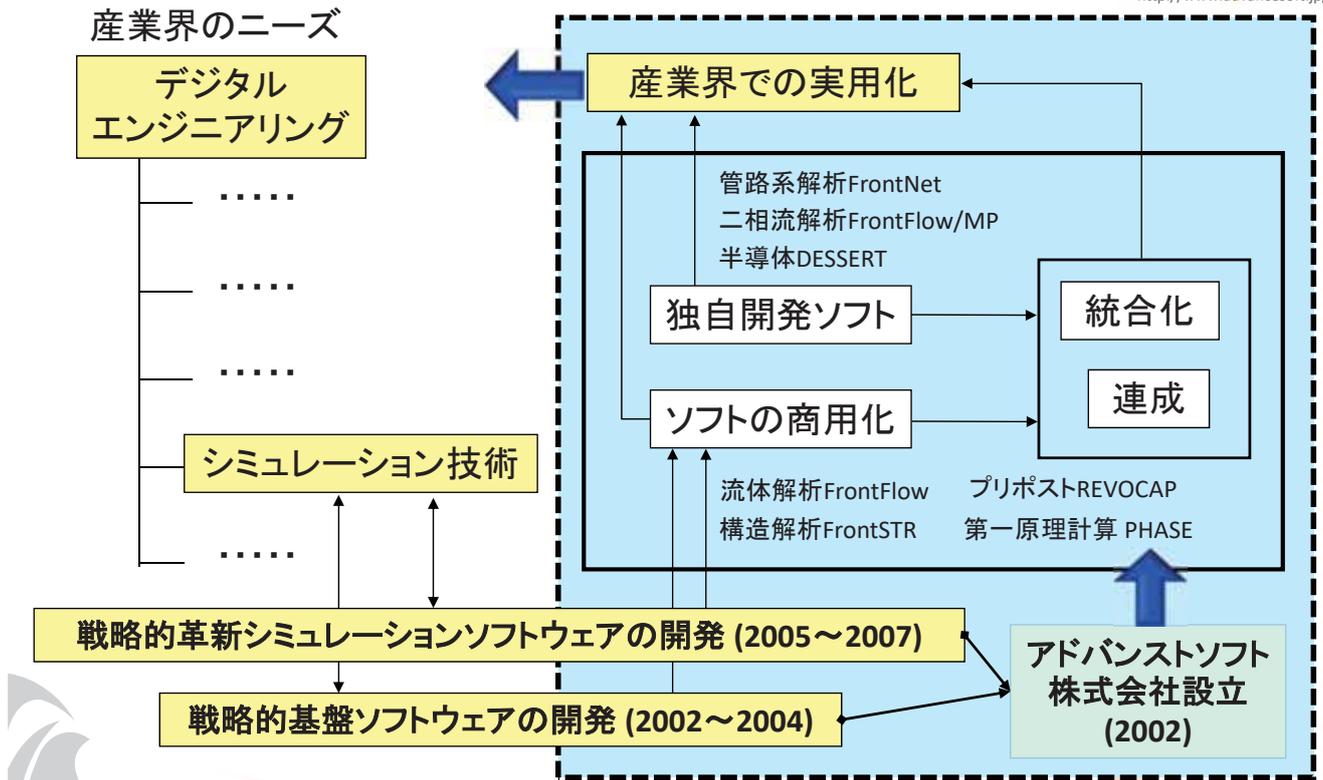
設立 2002年(平成14年)4月24日

資本金 3,724万円

社員数 102名(2019年4月1日時点)

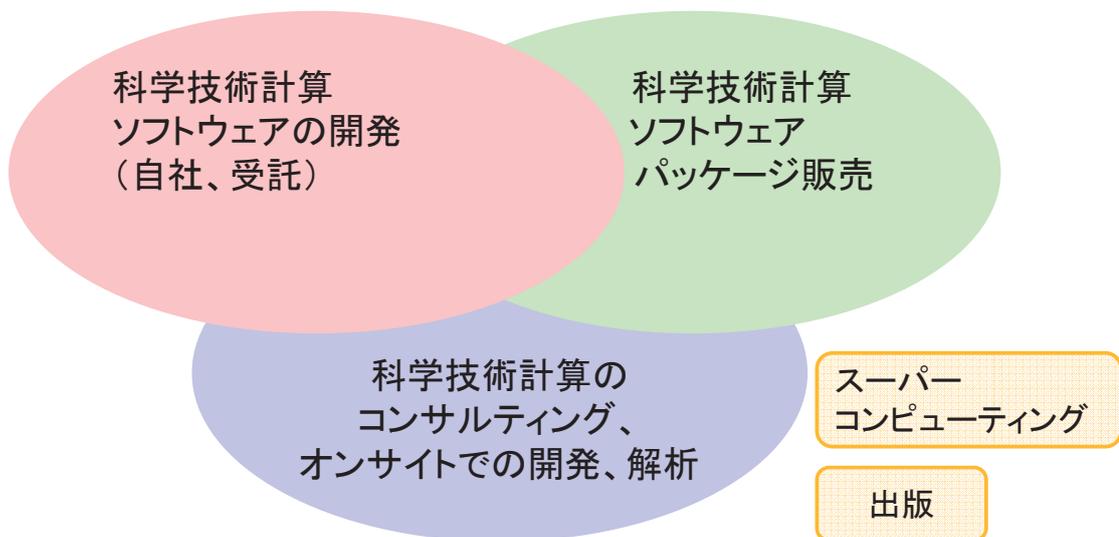


# アドバンスソフトとは



# 事業内容

## アドバンスソフトがご提供するサービス



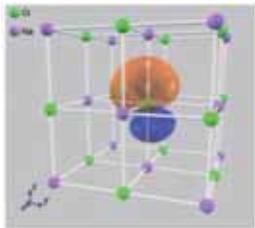
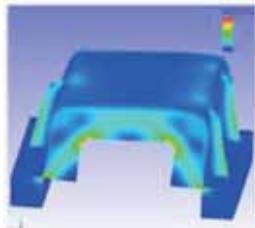
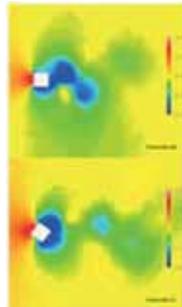
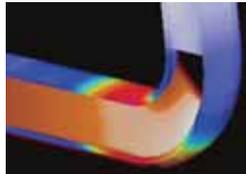
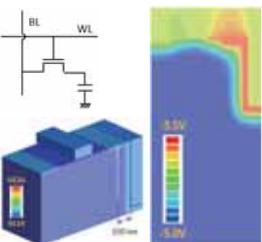
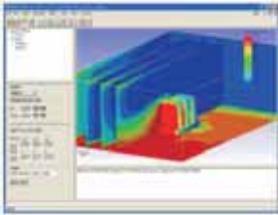
科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした、  
科学技術計算に関する様々なソリューションをご提供します。

# アドバンスソフトのパッケージソフトウェア

ソフトウェア名称	解析内容
Advance/NanoLabo	ナノ材料解析統合GUI
Advance/PHASE	第一原理計算ソフトウェア
Advance/FrontSTR	構造解析ソフトウェア
Advance/FrontNoise	音響解析ソフトウェア
Advance/TCAD	半導体プロセス・デバイスシミュレータ
Advance/ParallelWave	電磁波解析ソフトウェア
Advance/REVOCAP	構造解析・流体解析プリポストプロセッサ
Advance/FrontFlow/red	流体解析ソフトウェア
Advance/FrontFlow/MP	気液二相流解析ソフトウェア
Advance/FrontFlow/FOCUS	高速流・爆発解析ソフトウェア
Advance/FrontNet	管路系1次元流体解析ソフトウェア群

※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) をご参照ください。

# アドバンスソフトのパッケージソフトウェア

<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</p> 	<p>Advance/FrontFlow/FOCUS</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> 	<p>Advance/FrontNetシリーズ</p> 	<p>Advance/FrontFlow/MP</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) をご参照ください。

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

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



## 本日の内容

- これまでは、本社のある東京でのセミナー開催が中心
- 東海地区でのセミナー開催は弊社初
- 電子・原子・分子レベルのシミュレーションを中心に紹介
  - 古典分子動力学計算ソフトウェア LAMMPS
  - 実空間第一原理計算ソフトウェア RSDFT
  - 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE
  - 材料設計GUIソフトウェア Advance/NanoLabo
  - 特別公演  
「第一原理計算による結晶欠陥のナノ構造解析」  
名古屋大学大学院 工学研究科 物質工学専攻 松永克志 教授

# 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、実空間第一原理計算、第一原理計算、GUI～  
2019年4月26日（金）  
アドバンスソフト株式会社



## 概要

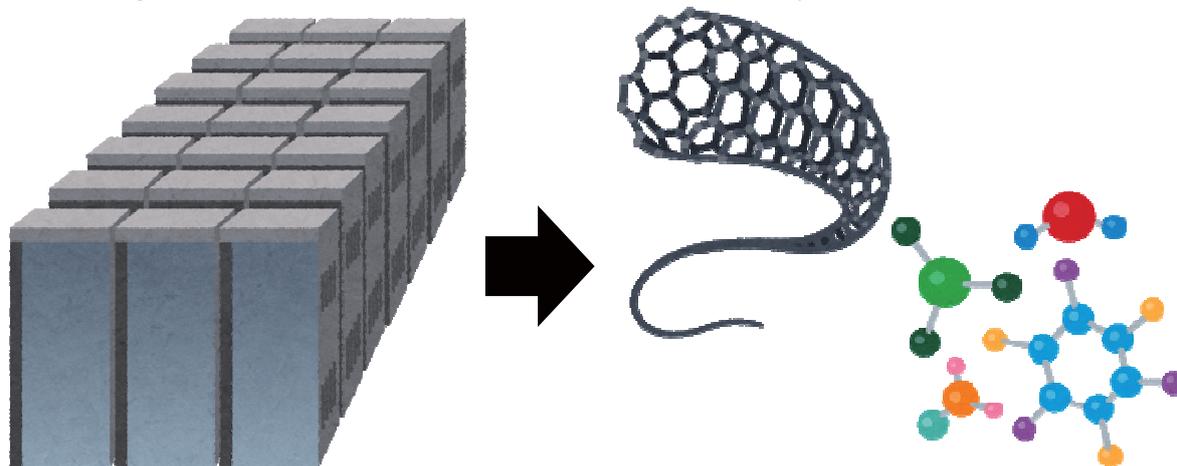
- ① LAMMPSについて
- ② 分子動力学計算(MD: Molecular Dynamics)について
- ③ 主な適用範囲
- ④ 主な適用例
- ⑤ 参考文献



# LAMMPSとは

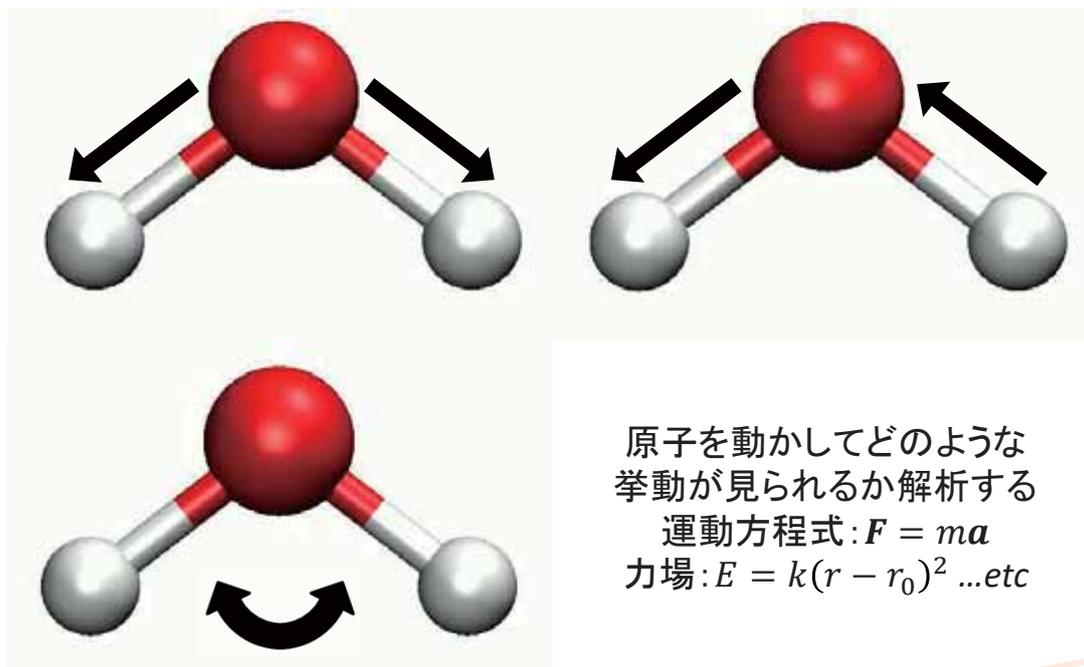
## ➤ 分子動力学計算を行うためのソフトウェア

- 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



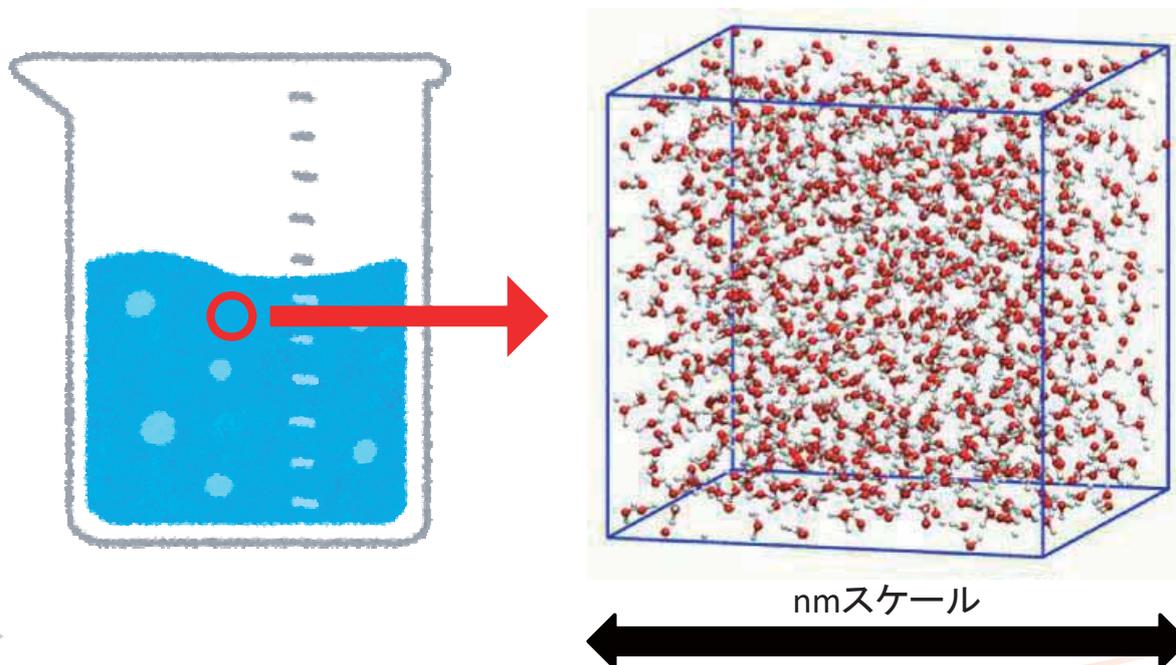
# 分子動力学計算(MD)とは

## ➤ 原子に関する運動方程式を解く計算



# 分子動力学計算(MD)とは

➤ 微小な領域で原子集団を運動させる計算

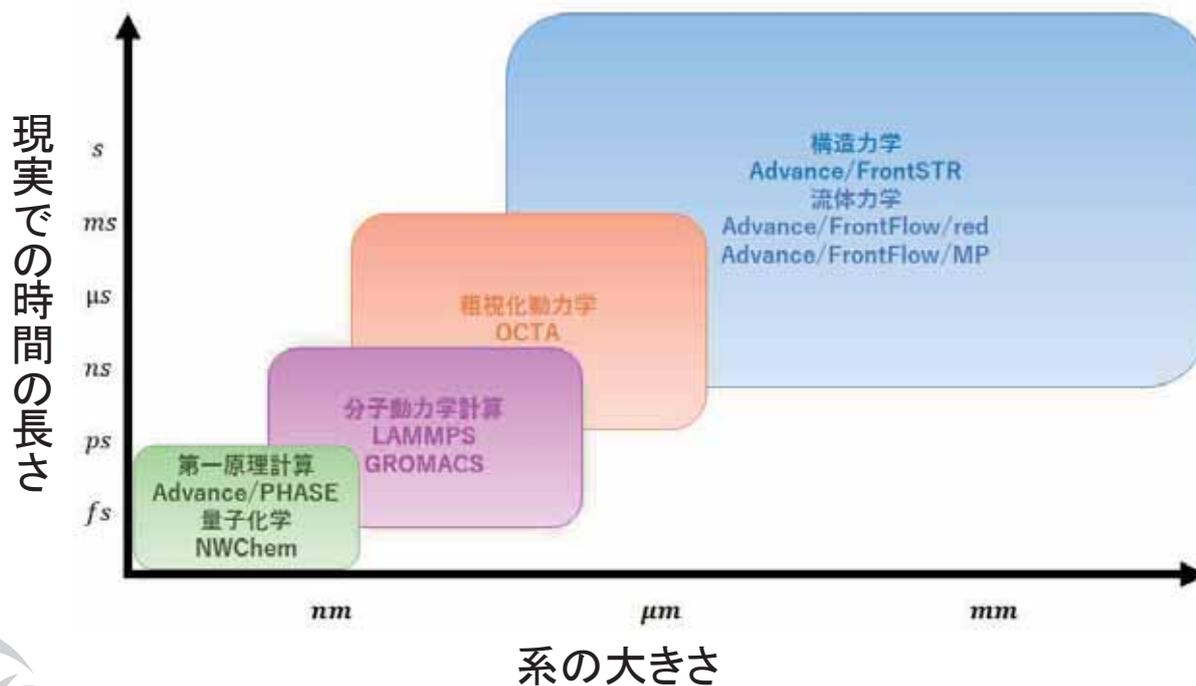


# 分子動力学計算からわかること

➤ 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

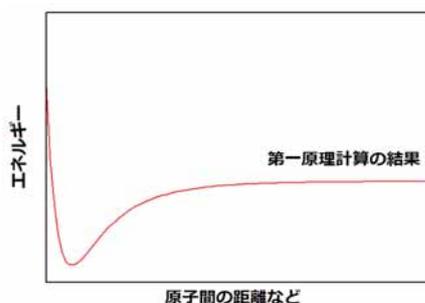
# 分子動力学計算の主な適用範囲



## 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

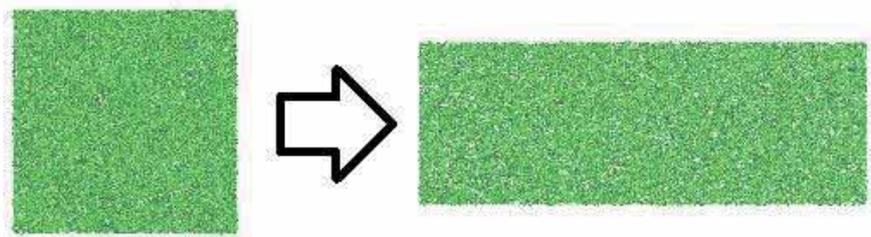


調和振動子:  $k(r - r_0)^2$   
LJ:  $\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$   
などの関数(相互作用の式)に射影

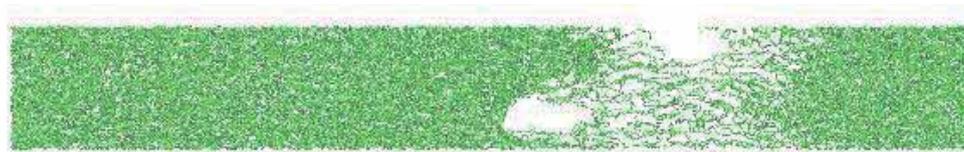
- 流体計算や構造計算よりは小さい系を扱う  
⇒ 流体計算や構造計算のためのパラメータの計算が可能  
ex) 拡散係数等の輸送係数、ヤング率等の弾性率

# 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

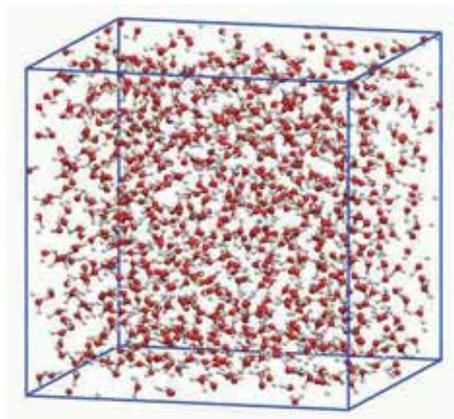
- テーマに合わせて受託解析を実施
- トレーニングや導入・利用サポートを実施
- コンサルティングの実施
- 使い勝手の良いGUIであるNanoLaboの販売

# 主な適用例

## ➤ 具体的にどのようなテーマが扱えるか

- 輸送係数(熱伝導率等)の計算
- アモルファス構造の作成
- 樹脂の硬化(高分子構造作成)
- 機械特性(ヤング率等)の計算
- 接着剤の接着強度や剥離現象
- 沸騰(冷却)現象
- 結晶成長
- 分子の吸着・侵入現象
- 化学気相成長(CVD)
- etc...(原子分子レベルの解析一般)

## ①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

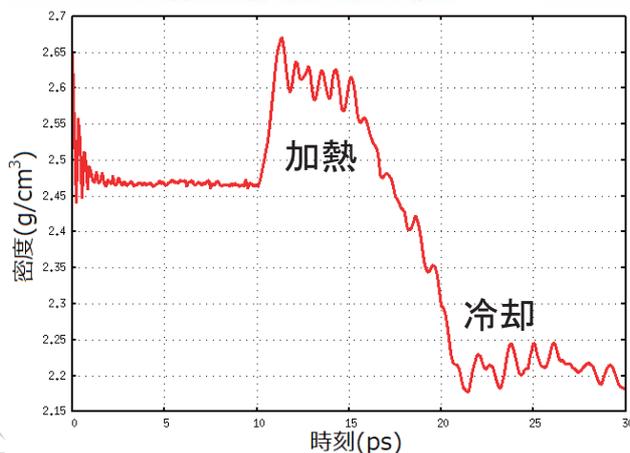
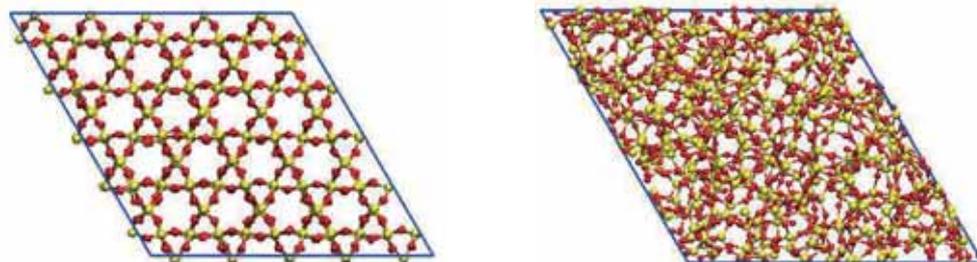
$$\text{拡散係数} : D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \langle v(0) \cdot v(t) \rangle dt$$

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

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

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

## ②アモルファス構造の作成



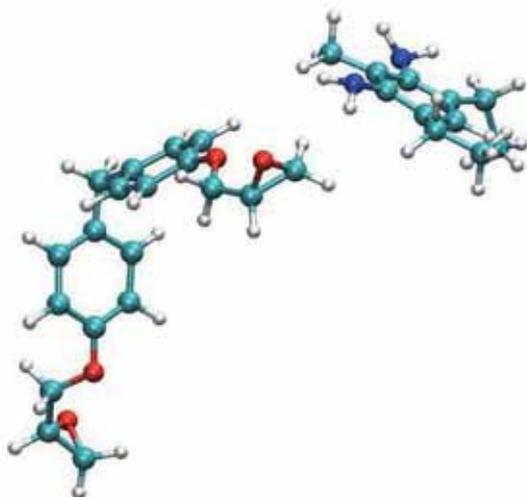
液状のガラスを急冷することで  
アモルファス構造が得られる



第一原理計算への転用や  
強度解析の実施など

## ③樹脂の硬化(高分子構造作成)

➤ 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

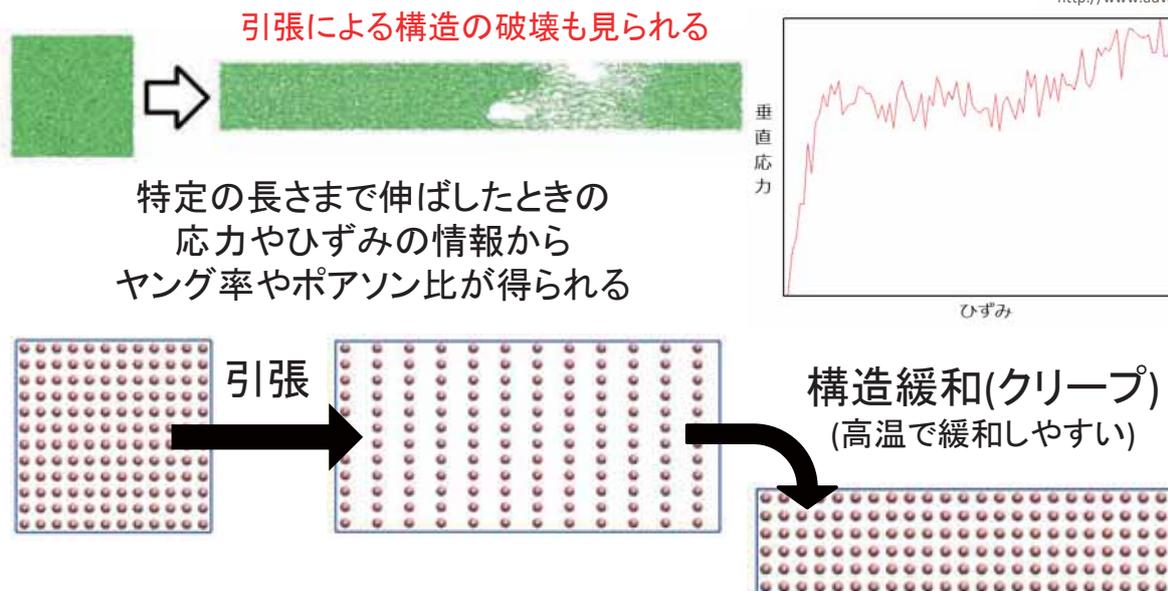
- 原子間の距離
- 反応確率
- 反応を起こす時間

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

- 樹脂だけに限らず一般的な高分子のモデル作成が可能
- フィラーなどとの縮合状態の検討も可能

重合率や架橋した分子数分布についての時間依存性解析や、  
重合率の異なる高分子が存在する系の模擬に利用可能

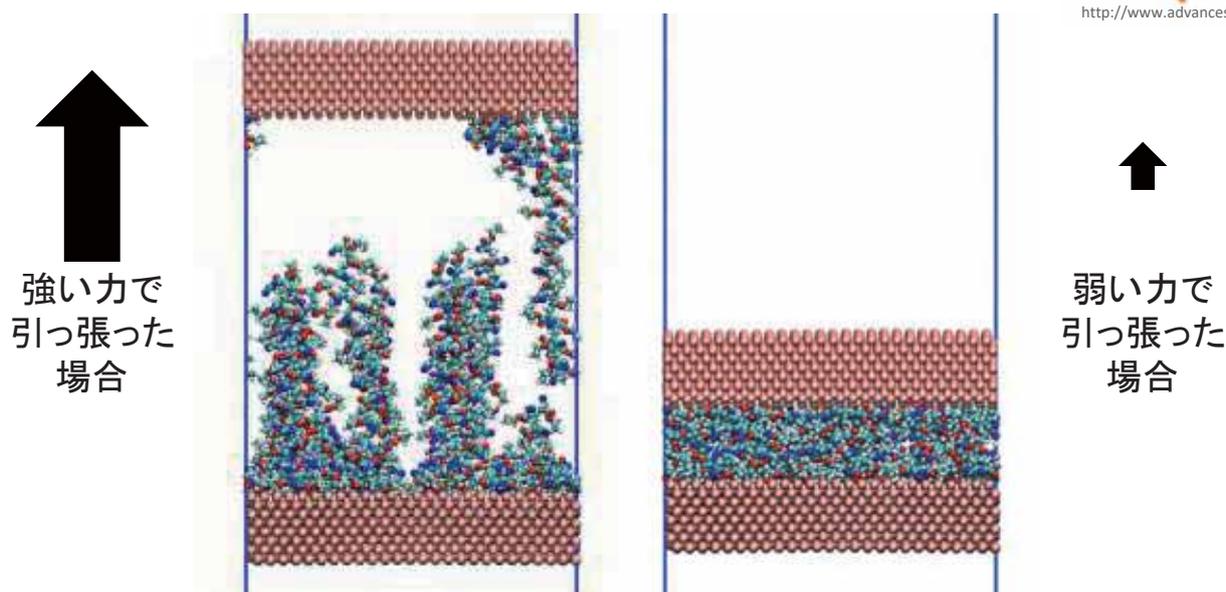
## ④機械特性(ヤング率等)の計算



### 局所的な特性の解析

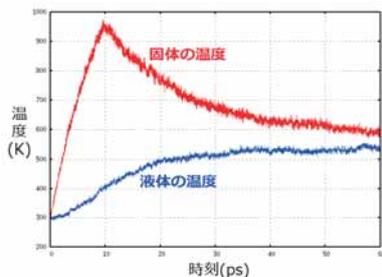
- ① マクロな現象における問題点の原因探索
- ② マクロな計算における各メッシュに物性値を与える

## ⑤接着剤の接着強度や剥離現象

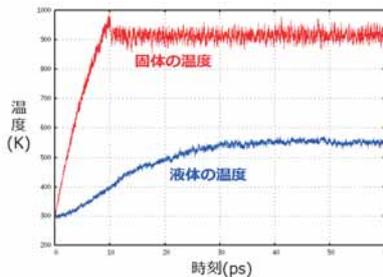


剥離が生じる強度の解析や剥離メカニズムの解析  
表面状態(修飾基や形状)の違いによる強度の変化などや  
層内破壊についても解析可能

## ⑥沸騰(冷却)現象



短時間加熱した場合

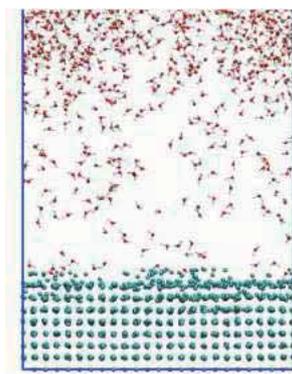
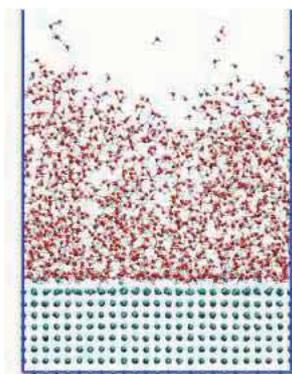


加熱し続けた場合

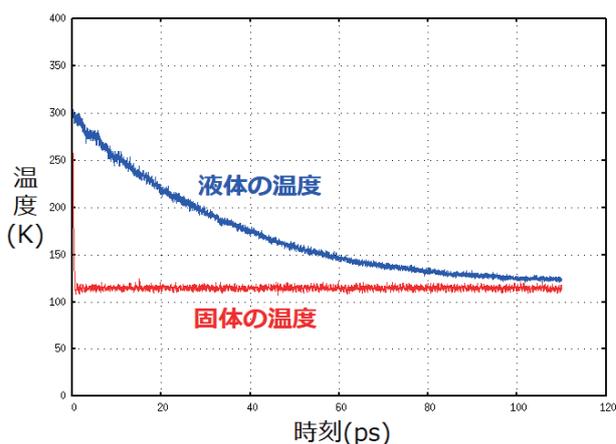
加熱の状態に応じた  
液体の蒸発や  
膜沸騰の解析が可能



- 加熱の仕方による沸騰様式の違いの解析
- 表面形状(凸凹等)による違いも解析可能
- 輻射の効果も解析可能



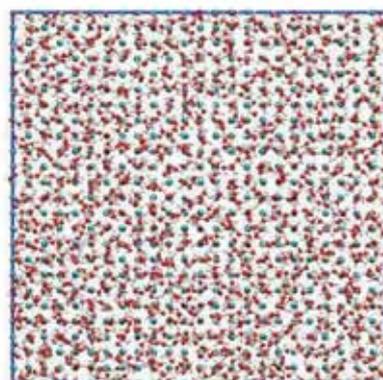
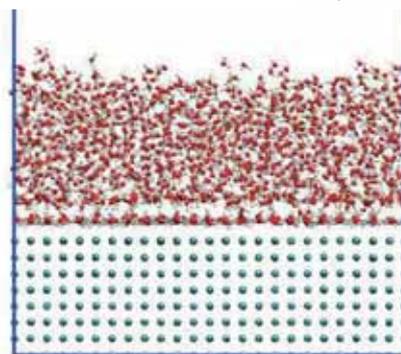
## ⑦結晶の成長



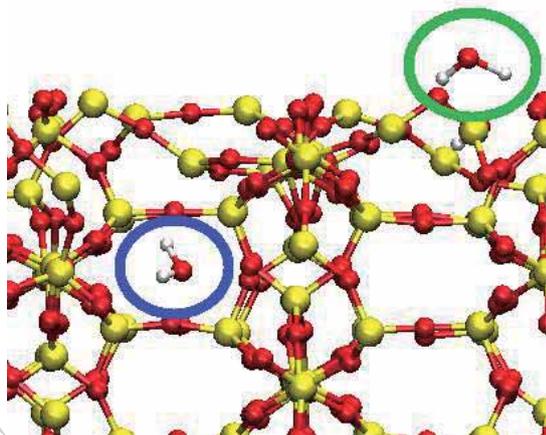
液体の冷却(運動量減少)による  
凝固した状態への遷移



- 冷却速度による影響を解析可能
- 表面形状による違いも解析可能
- 固液界面だけでなくバルクの液体がどのように結晶化するかも解析可能



## ⑧分子の吸着・侵入現象

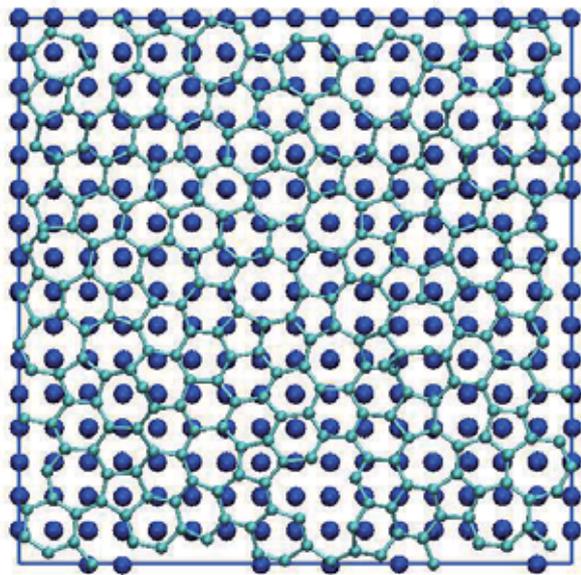


分子の運動による吸着や侵入、  
特定の圧力環境下での吸着



吸着の安定性や侵入パスの解析、  
浸透率の予測、吸着等温線の予測

## ⑨化学気相成長(CVD)



LAMMPSでは化学反応を明示的に  
取り扱うことが可能なReaxFFという  
力場が用意されている



固体表面で重合反応が起こるCVD  
やエッチング等を扱うことも可能

反応性を考慮した力場を用いると人為的な反応ではなく、  
より第一原理的なエネルギー論に従って化学反応を取り扱えます。

# MDに関する参考文献(抜粋)

## LAMMPSについて

- <https://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>

## 輸送係数の計算

- Calculation of diffusion coefficient of long chain molecules using molecular dynamics
- Molecular Dynamics Simulation Study for Shear Viscosity of Water at High Temperatures using SPC/E Water Model

## アモルファス構造の作成

- Graphitization of amorphous carbons: a comparative study of interatomic potentials
- MD Sliding Simulations of Amorphous Tribofilms Consisting of either SiO<sub>2</sub> or Carbon

## 樹脂の硬化

- Molecular Dynamics Simulation of Cross-Linked Epoxy Polymers: the Effect of Force Field on the Estimation of Properties
- Curing reaction of epoxy resin composed of mixed base resin and curing agent: Experiments and molecular simulation

## 機械特性の計算

- Crosslinking PMMA: Molecular Dynamics Investigation of the Shear Response
- Mechanical properties of hydrogen functionalized graphene under shear deformation: A molecular dynamics study



# MDに関する参考文献(抜粋)

## 接着剤の接着強度や剥離現象

- Mechanomutable properties of a PAA/PAH polyelectrolyte complex: rate dependence and ionization effects on tunable adhesion strength
- Atomistic simulation of metal-polymer adhesion

## 沸騰(冷却)現象

- Molecular dynamics simulation on rapid boiling of water on a hot copper plate
- Numerical experiments on evaporation and explosive boiling of ultra-thin liquid argon film on aluminum nanostructure substrate

## 結晶成長

- Bridging the multi phase-field and molecular dynamics models for the solidification of nano-crystals
- Recrystallization of picosecond laser-melted ZnO nanoparticles in a liquid: A molecular dynamics study

## 分子の吸着・侵入現象

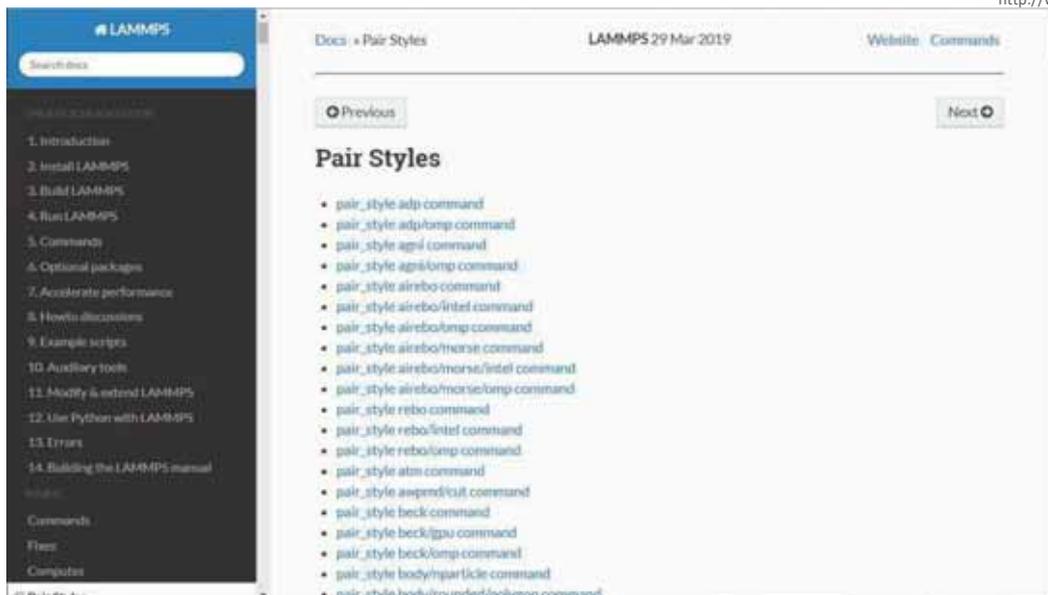
- Molecular Dynamics Simulations of Gas Selectivity in Amorphous Porous Molecular Solids
- Modeling of Adsorption and Desorption in Pores of Simple Geometry Using Molecular Dynamics

## 化学気相成長(CVD)

- Molecular dynamics simulation of graphene growth on Ni(100) facet by chemical vapor deposition
- Molecular simulation of graphene growth by chemical deposition on nickel using polycyclic aromatic hydrocarbons

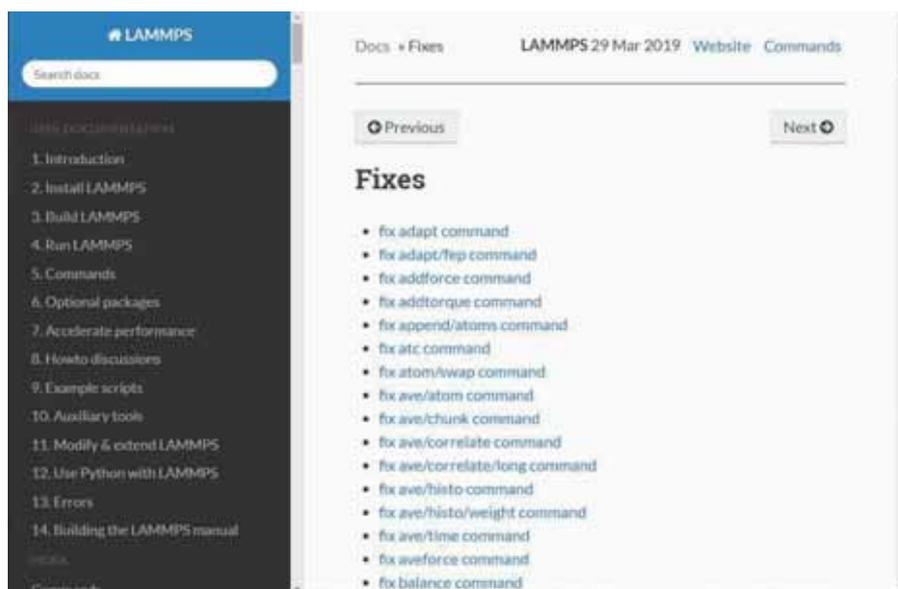


# 参考動画1(Pair Styles)



ややこしいことは外注する、専門家にお任せいただく、  
使いやすいものを買うなど、  
賢明なご判断が大事だと思います。

# 参考動画2(Fixes)



ややこしいことは外注する、専門家にお任せいただく、  
使いやすいものを買うなど、  
賢明なご判断が大事だと思います。

# 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。





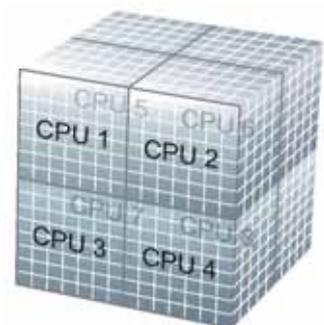
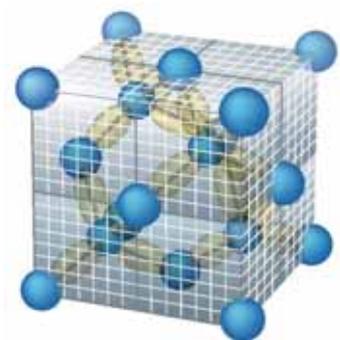
# 実空間第一原理計算ソフトウェア RSDFTのご紹介

ナノシミュレーション研究開発センター 岩田 潤一

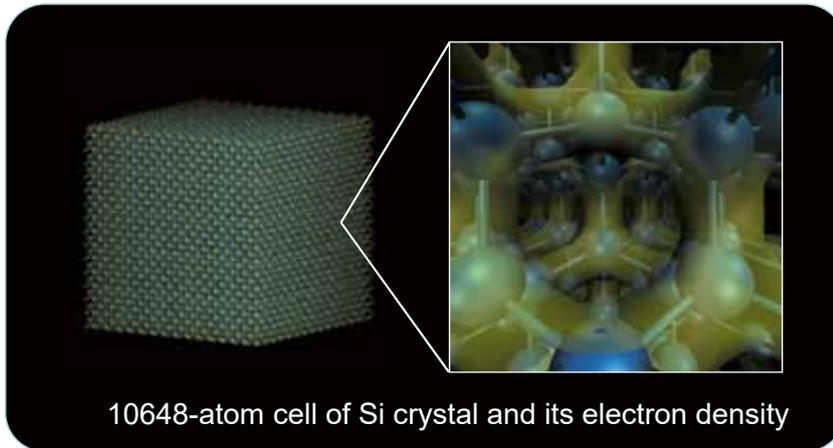
ナノ材料シミュレーションセミナー  
～古典分子動力学、実空間第一原理計算、第一原理計算、GUI～  
2019年4月26日（金）  
アドバンスソフト株式会社

## 実空間第一原理計算とは

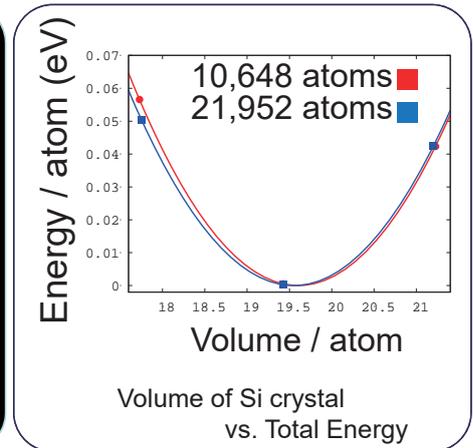
- 実空間法(差分法)
  - グリッド並列がしやすい
  - 超並列計算向き
- 平面波法(逆空間法)(主流)
  - グリッド並列がしにくい
  - (高速フーリエ変換の並列化が必要)
- 平面波法と実空間差分法は共通点が多い
  - 同じ数値アルゴリズム
  - グリッド以外の並列化の仕方は同じ
  - 平面波法で計算できる事は実空間法でもできる
  - カットオフ(グリッド幅)で精度をコントロール
  - 境界条件の柔軟性は実空間法に分がある
  - グリッドが粗いとEgg-Box効果という平面波法には無い誤差が生じる



# Structural property of bulk Si crystal



10648-atom cell of Si crystal and its electron density



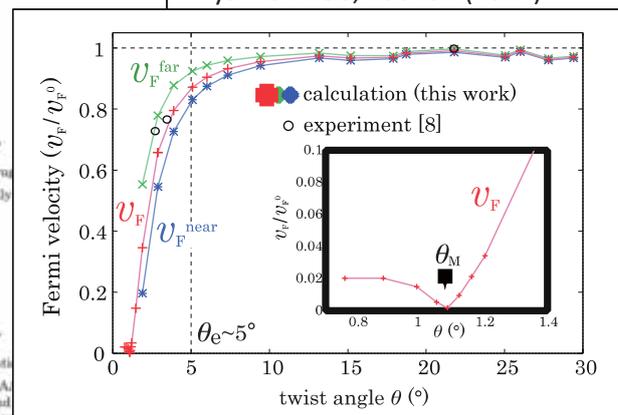
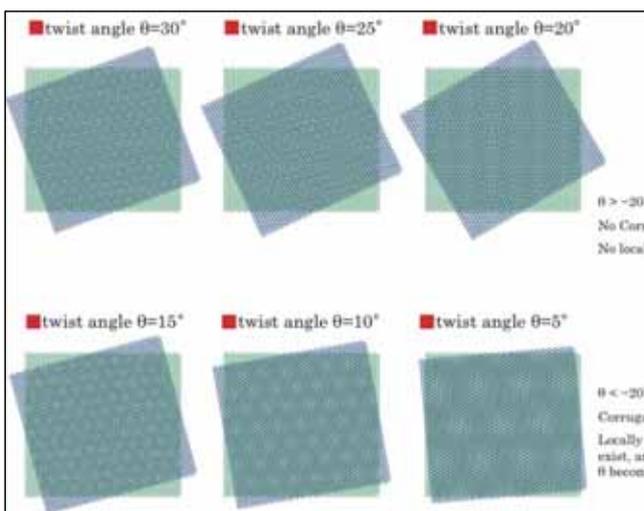
Volume of Si crystal vs. Total Energy

LDA = Local Density Approximation (exchange-correlation functional)

	LDA (21,952 atoms)	LDA (10,648 atoms)	LDA (2 atoms)	Expt.
Lattice constant	5.39Å	5.39Å	5.39Å	5.43Å

# twisted bilayer graphene

K. Uchida et al.,  
Phys. Rev. B90, 155451 (2014)



Elapsed time for 1 step of SCF loop at K computer (841 nodes)

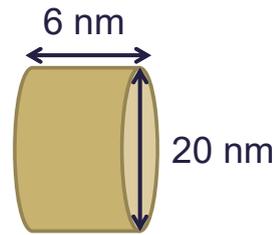
atoms	SCF	CG	GS	SD
22,708	2980	446	710	1452

single k point  
real\*8

# full-node test @K ( Silicon Nanowire )

system : Si nanowire ( 107,292 atoms )  
 grid : 576 x 576 x 180 = 59,719,680  
 band : 230,400

nodes: 82,944 ( 10.6 PFLOPS peak )  
 cores : 663,552



Elapsed time for 1 step of SCF iteration

	SCF	CG $O(N^2)$	GS $O(N^3)$	SD $O(N^3)$	SD (mate)	SD (Eigen)	SD (rotation)
time (s)	2931	160	946	1797	525	493	779
PFLOPS	5.48	0.06	6.70	5.32	6.15	0.01	8.14
peak%	51.67	0.60	63.10	50.17	57.93	1.03	76.70

Y. Hasegawa *et al.*, J. High Perform. Comp. Appl. 28, 335 (2014)

## History of RSDFT



**Three-dimensional time-dependent Hartree-Fock calculation :**

**Application to  $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$  collisions**

H. Flocard, S. E. Koonin and M. S. Weiss  
 Phys. Rev. **C17**, 1682 (1978).

**Higher-order finite-difference pseudopotential method: An application to diatomic molecules**

J. R. Chelikowsky, N. Troullier, K. Wu, and Y. Saad  
 Phys. Rev. **B50**, 11355 (1994).

**Time-dependent local-density approximation in real time**

K. Yabana and G. F. Bertsch  
 Phys. Rev. **B54**, 4484 (1996).

**Real-space, real-time method for the dielectric function**

G. F. Bertsch, J.-I. Iwata, A. Rubio, and K. Yabana  
 Phys. Rev. **B62**, 7998 (2000).

<https://salmon-tddft.jp/>  
<https://octopus-code.org/>



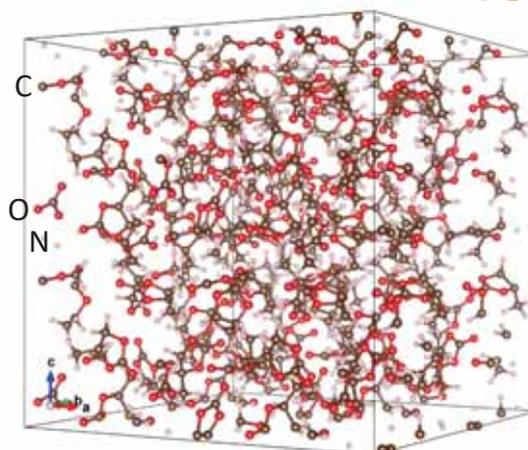
J.-I. Iwata *et al.*, J. Comp. Phys. 229, 2339 (2010).  
<http://github.com/j-iwata/RSDFT>

AWARD  
 ACM Gordon Bell Prize (2011)

Y. Hasegawa, *et al.*, SC'11 Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis

# RS-CPMD

propylene carbonate (1664 atoms)  
 # of grid points :  $160 \times 160 \times 160 = 4,096,000$  ( $\sim 103$  Ry)  
 # of bands : 2560



	MPI_WTIME (sec.)
<b>PW-CPMD</b>	1 MD step
512 MPI $\times$ 8 OMP (4096 cores)	11.9

CPMD (<http://www.cpmd.org>) tuned for K computer

	MPI_WTIME (sec.) ( FLOPS/PEAK % )				
<b>RS-CPMD</b>	1 MD step	rotorb	Hamiltonian & Force	Hamiltonian operation	rotorb2
512 MPI $\times$ 8 OMP (4096 cores)	5.54 (37.5 %)	2.69	0.52	0.44	1.83

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

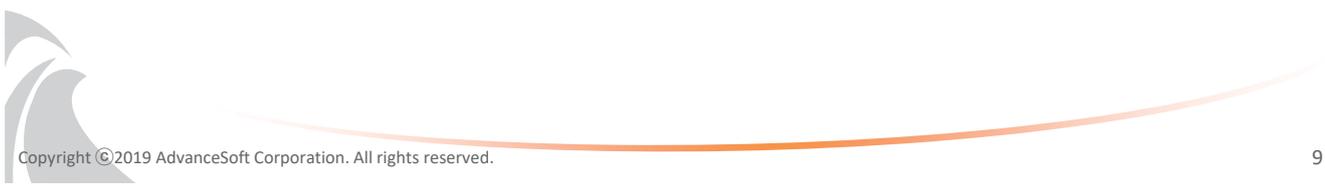
7

## 計算例のご紹介

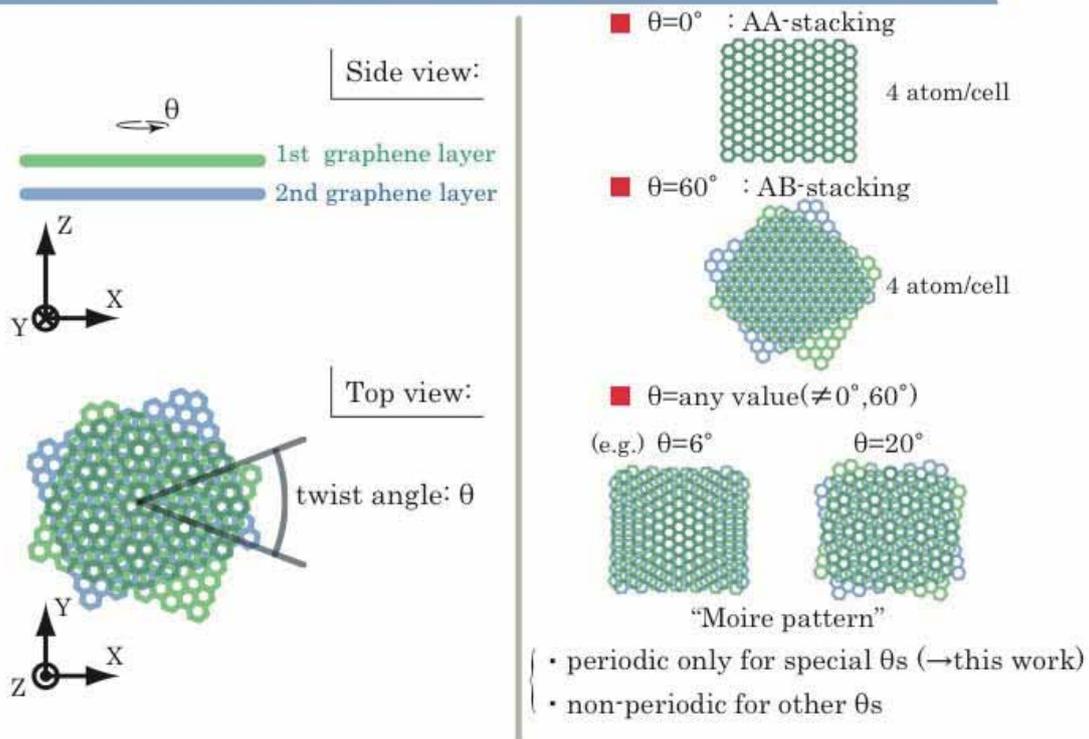
8

K. Uchida, S. Furuya, JI, A. Oshiyama  
 Phys. Rev. B90, 155451 (2014).

# 捻れ二層グラフェン



## What is Twisted Bilayer Graphene (tBLG)?



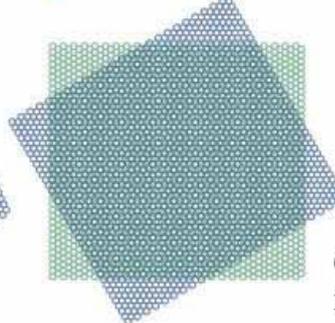
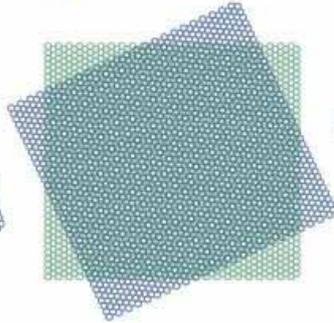
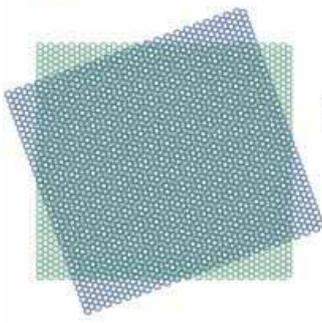
\*Assumption: In the above and following, an A-site atom is on the twist axis in each graphene. Other cases will be also discussed later (consideration of lateral translations).

# Relation between Corrugations and Stacking Structures

■ twist angle  $\theta=30^\circ$

■ twist angle  $\theta=25^\circ$

■ twist angle  $\theta=20^\circ$



$\theta > \sim 20^\circ$

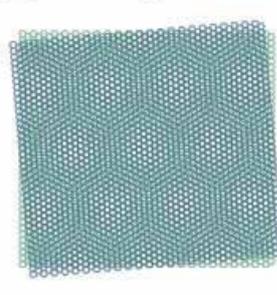
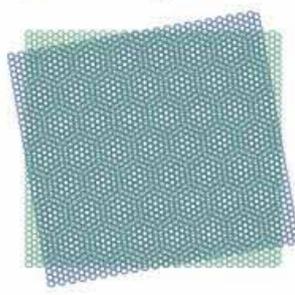
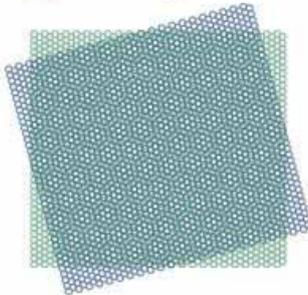
No Corrugation

No locally AA/AB stacked regions

■ twist angle  $\theta=15^\circ$

■ twist angle  $\theta=10^\circ$

■ twist angle  $\theta=5^\circ$



$\theta < \sim 20^\circ$

Corrugation

Locally AA/AB stacked regions exist, and become larger as  $\theta$  becomes smaller

Copyright © 2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

11

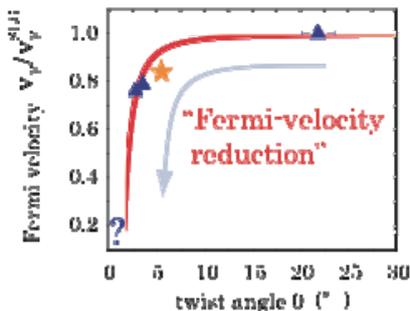
## Why tBLG?



### ① STM+STS for Twisted Graphene Layers

Luican et al. : PRL 106, 126802 (2011)

(STM → Moire → twist angle :  $\theta$   
STS under magnetic field → Landau levels → Fermi velocity :  $V_F$ )



- ▲ : STM+STS
- : continuum tight-binding calc.
- ★ : DFT calc [Trambly et al. Nano Lett 10, 804 (2010)]

■ Fermi velocity  $V_F$  is controlled by changing twist angle  $\theta$ .

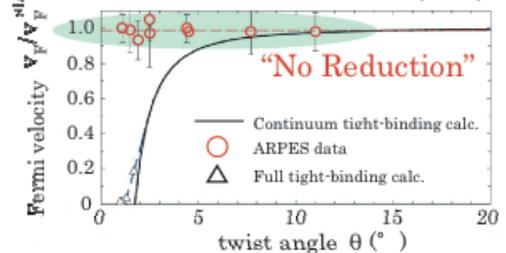
■ consistent with tight-binding calc. for tBLGs

However, controversial



### ② ARPES

Hicks et al. : PRB 83, 205403 (2011)



THIS WORK :

We wish to know if the Fermi-velocity reduction is true or not.

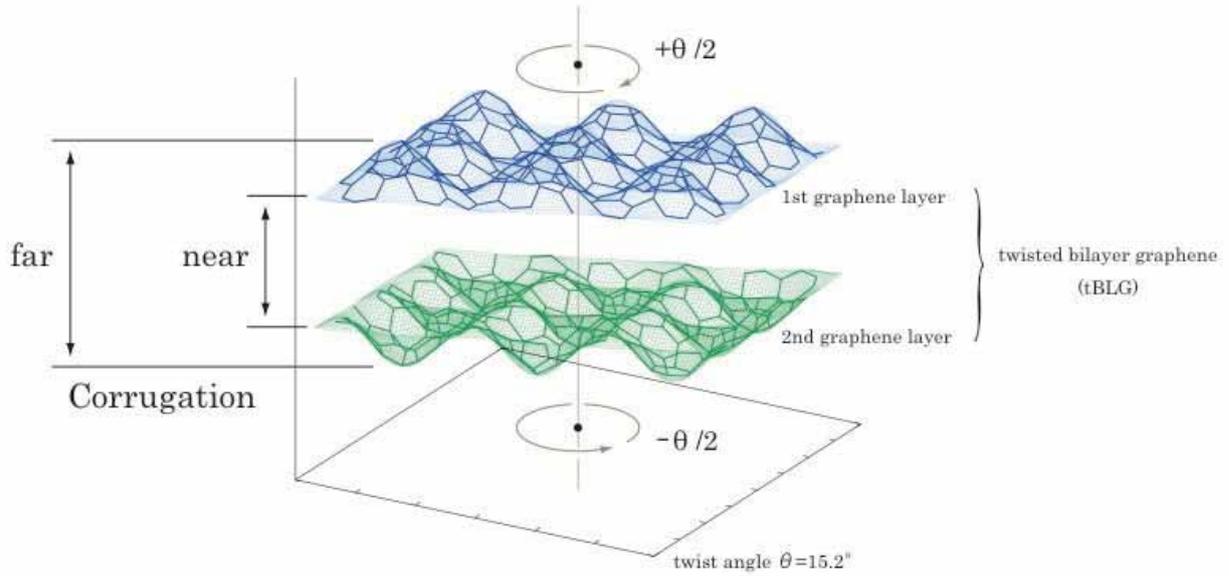
→ DFT calculations for tBLGs

Copyright © 2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

12

# Atomic-structure Optimization

K. Uchida et al.  
Phys. Rev. B90, 155451 (2014)

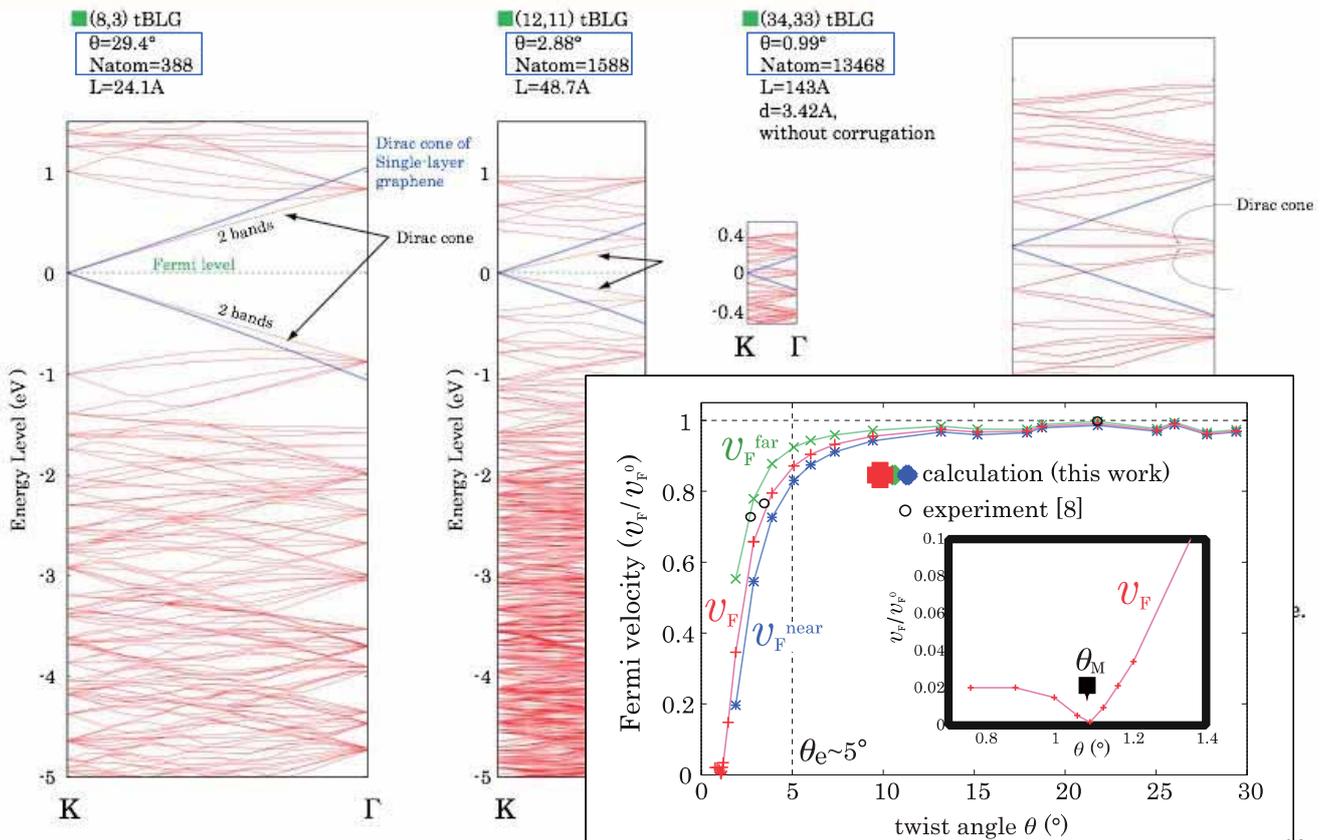


Copyright © 2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

13

# Fermi-velocity Reduction in tBLG

K. Uchida et al.  
Phys. Rev. B90, 155451 (2014)



Copyright © 2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

14

Jl, C. Shinei, A. Oshiyama  
Phys. Rev. B 93, 125202 (2016).

## 4H-SiC結晶中の多原子空孔



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

15

## SiC: パワーデバイスとしての期待

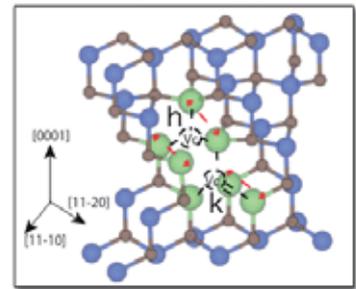
- 物性値上ではSiを上回るポテンシャルを有する
- しかし実際には期待値の10%程度しか出せていない
- さらなる性能向上を目指し、実験・理論の両面から活発な研究が続いている



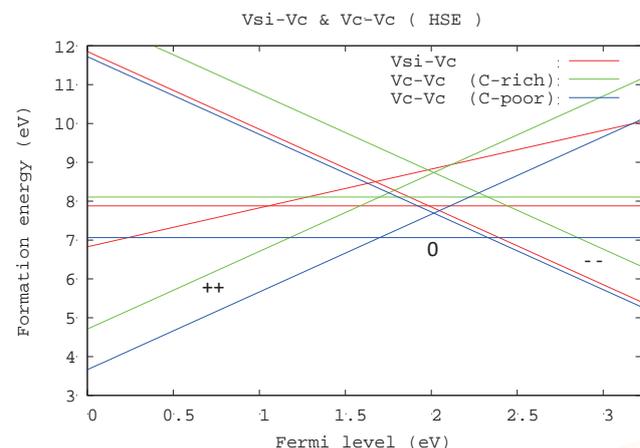
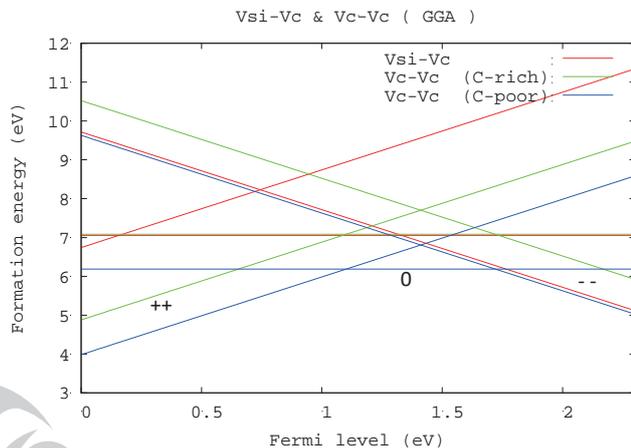
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

16

# Multi-atom vacancy in SiC



- Extended Dangling Bond Counting Model  
Prediction of the stability of multivacancies in SiC from the formation energy of monovacancies (Vc and Vsi) and the energy gain of the pairing relaxation
- In addition to the well known Vsi-Vc divacancy, **we have newly found Vc-Vc can also exist !**



Jl, C. Shinei, A. Oshiyama, Phys. Rev. B 93, 125202 (2016).

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

17



K. Sawada, Jl, A. Oshiyama  
Appl. Phys. Lett. 104, 051605 (2014).  
Phys. Rev. B 93, 235421 (2016).

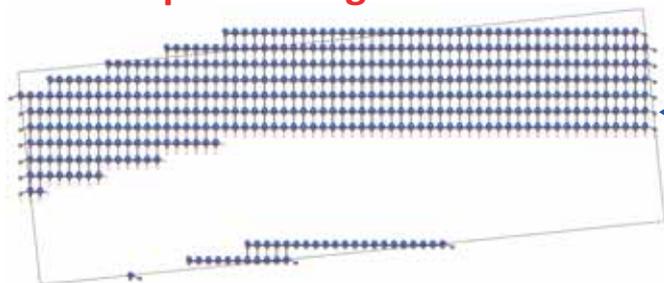
## 4H-SiC微斜表面の構造

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

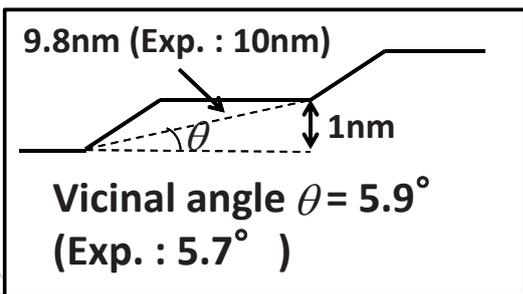
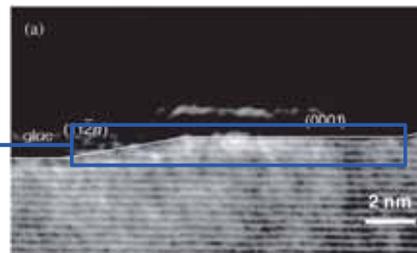
18

# ファセット構造の発現

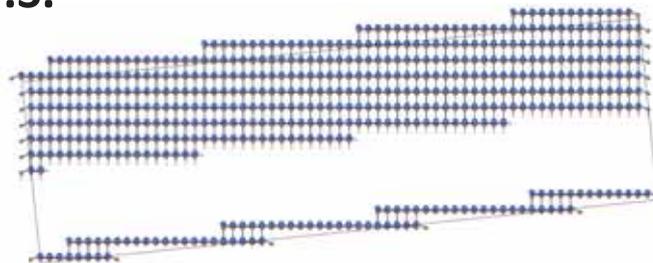
## Step bunching structure



TEM image M. Fujii and . Tanaka  
Phys. Rev. Lett. 99, 06102 (2007)

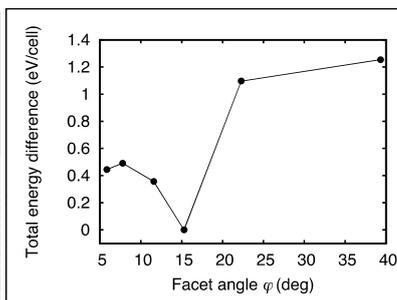
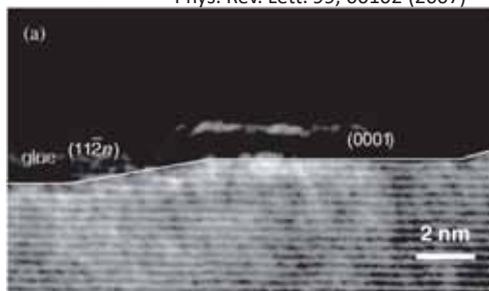


## V.S. Equally spaced step structure



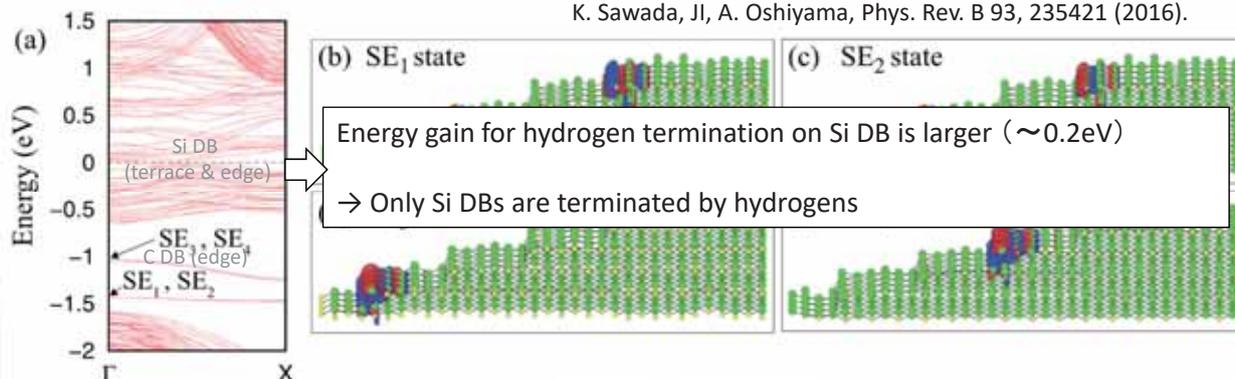
# Appearance of magnetism at the step edge of the nanofacet on the SiC surface

TEM image M. Fujii and . Tanaka  
Phys. Rev. Lett. 99, 06102 (2007)



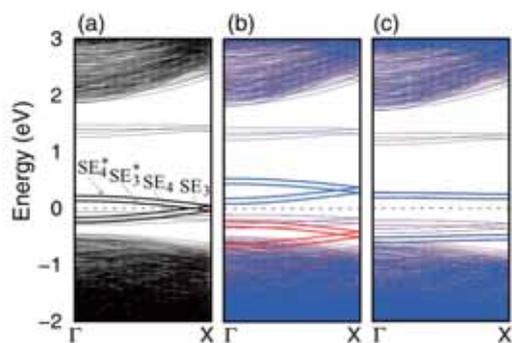
K. Sawada, J.I, A. Oshiyama  
Appl. Phys. Lett. 104, 051605 (2014).

K. Sawada, JI, A. Oshiyama, Phys. Rev. B 93, 235421 (2016).

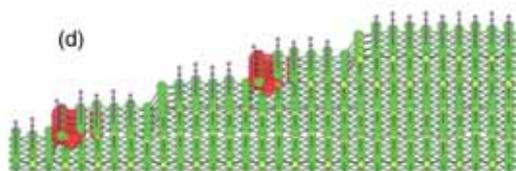


# Appearance of magnetism at the step edge of the nanofacet on the SiC surface

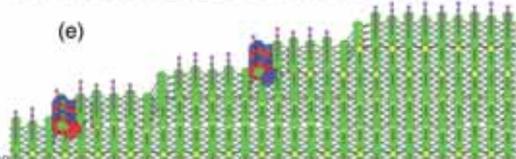
K. Sawada, JI, A. Oshiyama, Phys. Rev. B 93, 235421 (2016).



The results are not changed irrespective of the functional ( LDA, GGA, HSE )



Ferro



Antiferro ( more stable )  
( 5~30meV )

21

Copyright © 2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

Kieu My Bui, JI, Y. Kangawa, K. Shiraishi, Y. Shigeta, A. Oshiyama  
J. Phys. Chem. C122, 24665 (2018).  
J. Cryst. Growth. 507, 421 (2019).

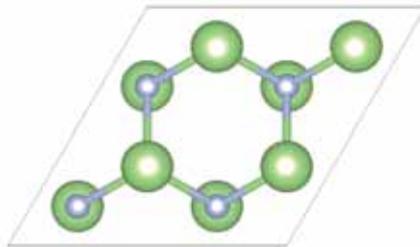
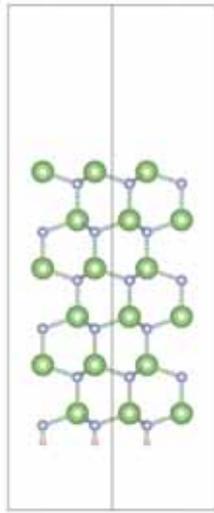
## GaN表面におけるNH<sub>3</sub>の分解

Copyright © 2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

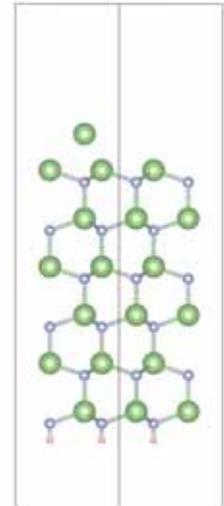
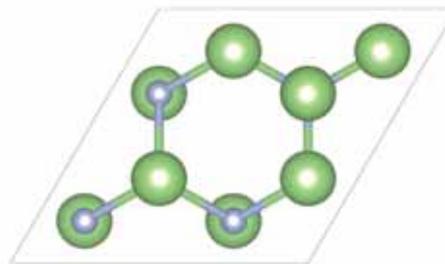
22

# GaN-2x2 Surface

bare structure



Ga-adatom structure



# Electron Counting Rule (ECR)

Bare surface  $\frac{3}{4} \times 4 = 3$  電子

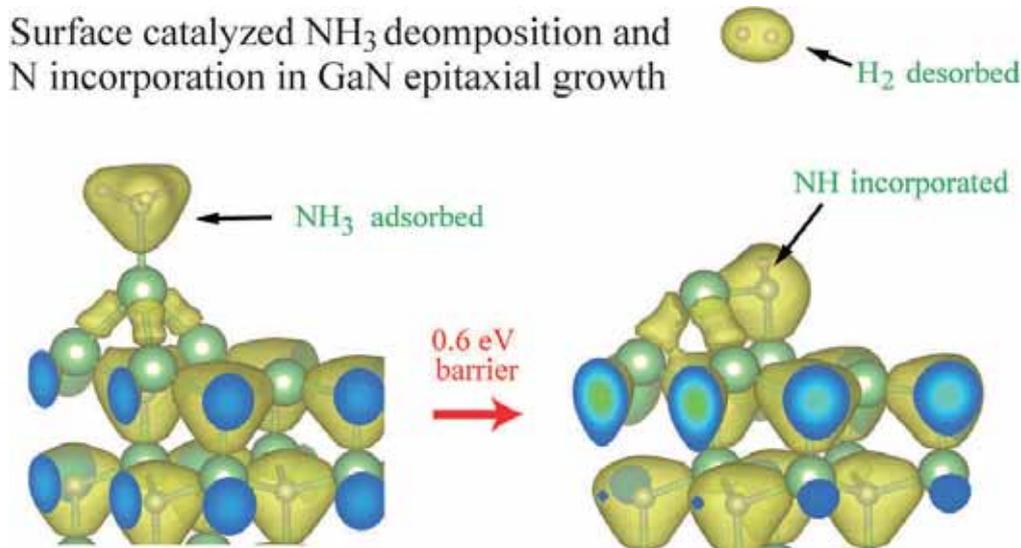
Ga adatom  $\frac{3}{4} \times 4 = 3$  電子

Ga adatom surface = 6 電子



3つボンドを作って、  
 1つのボンドを空にする電子構造  
 非常に安定化する事が示唆される

# A mechanism of epitaxial growth



Kieu My Bui et al., J. Phys. Chem. C 122, 24665 (2018).

## まとめ

<https://github.com/j-iwata/RSDFT>

- RSDFT
  - 実空間差分擬ポテンシャル法
  - FFTフリー
  - グリッド並列に向いている
- K computer ( 10 PFLOPS / 88,000 nodes )
  - LDA, GGA
    - 数千原子系の構造最適化 ( ~ 4000 atoms )
    - 数万原子系での電子状態計算 ( ~ 40,000 atoms )
  - Hybrid-XC
    - 数百~1千原子系での構造最適化 ( 100 ~ 1000 atoms )
- post-K computer ( ~ 1 EFLOPS )
  - 数万原子系での構造最適化
  - 「京」フルノードを貸し切ることができるジョブが、日常的なジョブとして実行可能になると期待される



# 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASEのご紹介

第1事業部 技術第1部 胡 春平

ナノ材料シミュレーションセミナー  
～古典分子動力学、実空間第一原理計算、第一原理計算、GUI～  
2019年4月26日（金）  
アドバンスソフト株式会社



## 概要

1. Advance/PHASEとは
2. 理論基礎
3. ソルバーの基本機能
4. ソルバーの特徴機能
5. 専用GUI

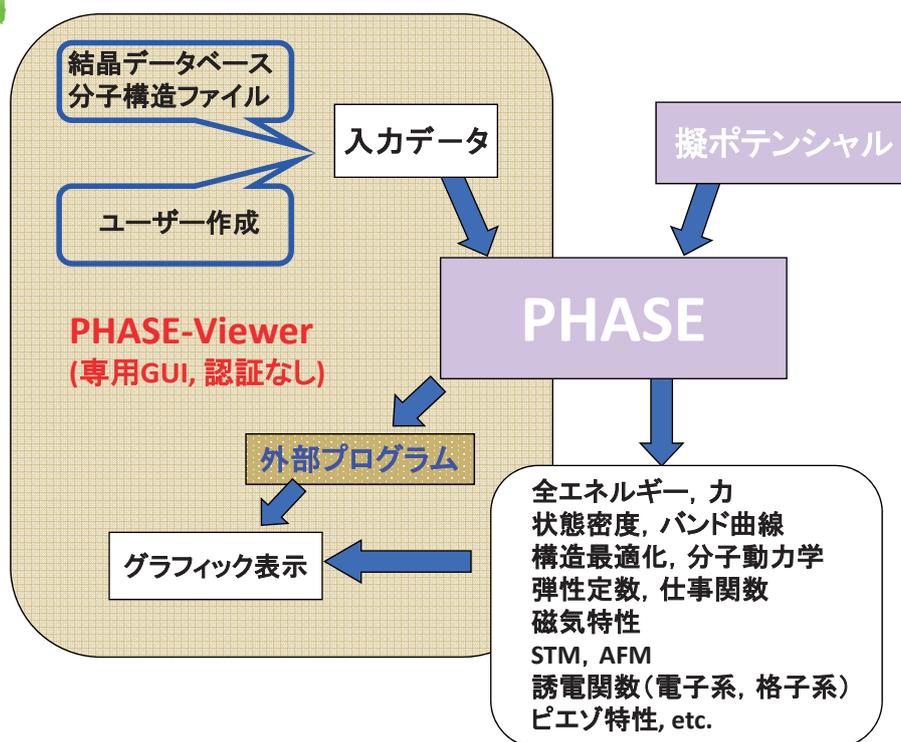


# Advance/PHASEとは

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

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

## Advance/PHASEの構成



# 密度汎関数法とは

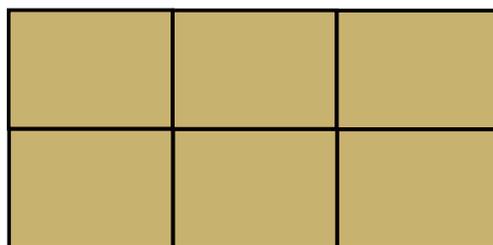
- 基底状態に関する量は全て、電子(電荷)密度の一意的でユニバーサルな**汎関数**(すなわち関数の関数)である。

## 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。**



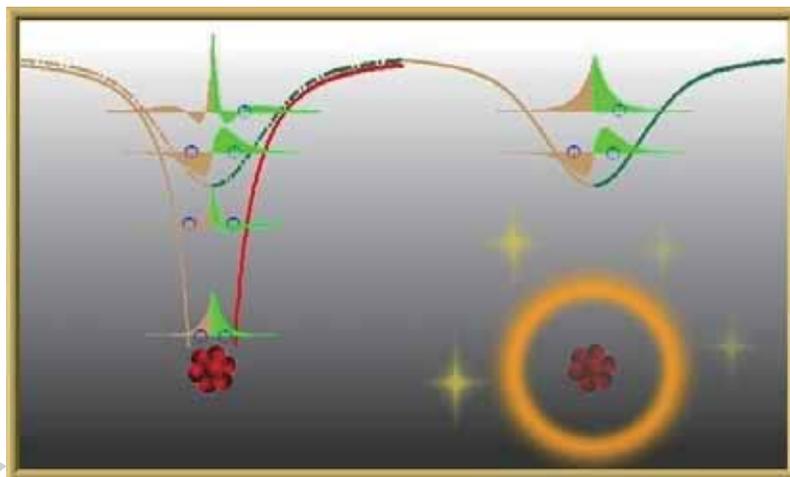
真空層を設けることにより、表面・界面などの二次元系、分子のような孤立系を取り扱うことも可能

# 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

## 主要解析機能

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、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、XAFS(X線吸収微細構造)/EELS(電子エネルギー損失分光)
分子動力学	NVE(エネルギー一定)、NVT(温度一定)
反応経路探索	Nudged Elastic Band(NEB)法、メタ・ダイナミクス法
雰囲気制御	Effective Screening Medium(ESM)法、Constant- $\mu$ 法、3D-RISM-SCF法
PostSCF解析	ストレス・テンソル、仕事関数、圧電定数、STM・AFM像
外部連携	BoltzTraP、Wannier90
解析支援	付属GUIによる入力ファイル作成、計算実行、計算結果の可視化

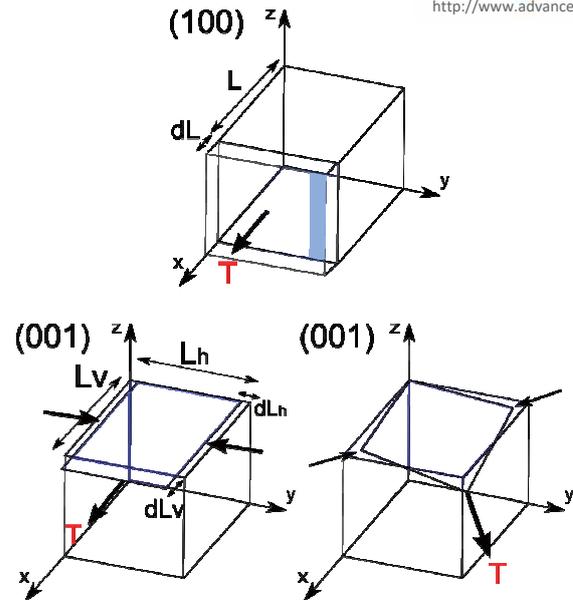
## ソルバーの基本機能紹介

- 弾性率
- 誘電率 (電子系、格子系)
- フォノン ( $\Gamma$ 点のみ、分散)
- 反応経路探索 (NEB)

## Si単結晶の弾性定数

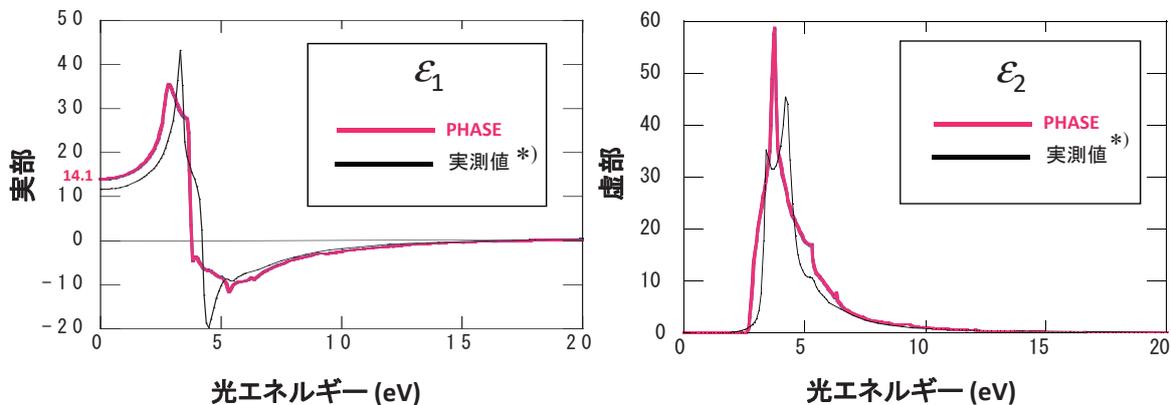
	PHASE	実験値*
<b>ヤング率E [GPa]</b>		
E<100>	123.6	130.8
E<110>	157.2	169.7
E<111>	172.9	188.4
<b>ポアソン比ν</b>		
ν (001)面内 <100><010>	0.262	0.280
ν (001) 面内 <110><110>	0.061	0.066

\*) 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。

## Siの誘電関数(電子系)

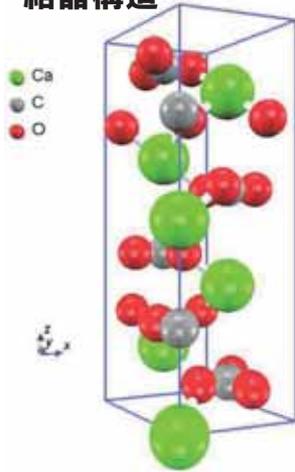


\*) CRC Handbook of Chemistry 79-th Ed. CRC Press, New York 1998

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

# 方解石(CaCO<sub>3</sub>; Calcite)

## 結晶構造



屈折率の異方性が大きい



ウィキペディアより

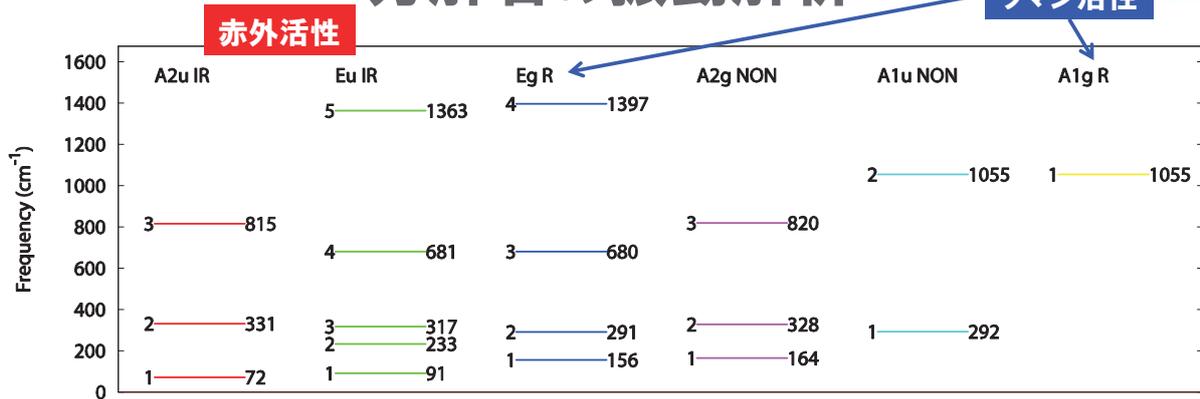
λ=589.3 nmにおいて  
n<sub>o</sub>=1.6584  
n<sub>e</sub>=1.4864  
E. Hecht, Optics 3<sup>rd</sup> ed.  
(Addison-Wesley, 1998)

Advance/PHASEで  
計算すると



λ=584.2 nmにおいて  
n<sub>o</sub>=1.6581  
n<sub>e</sub>=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<sup>-1</sup> ≒ 1 THz ≒ 4.1 meV

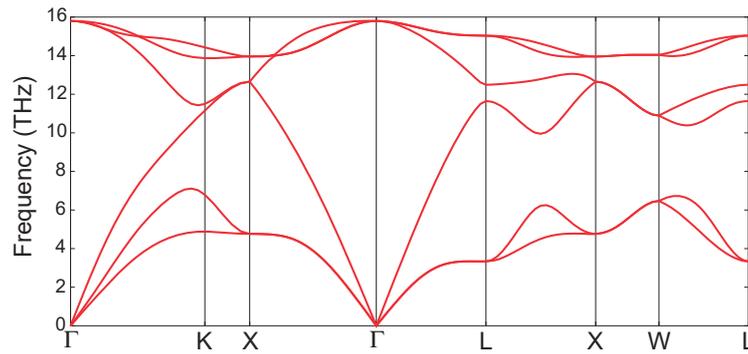
## 実験値

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

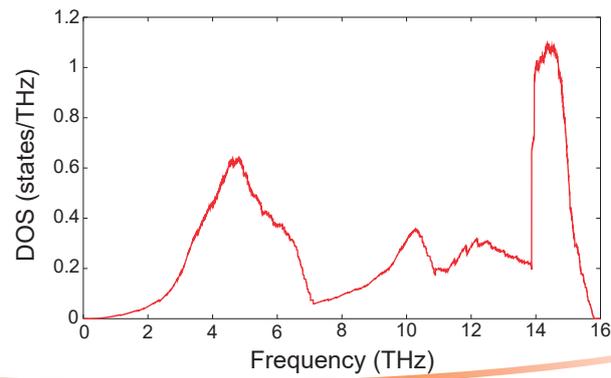
「光物性基礎」 工藤恵栄著、オーム社（1996）

# フォノン分散

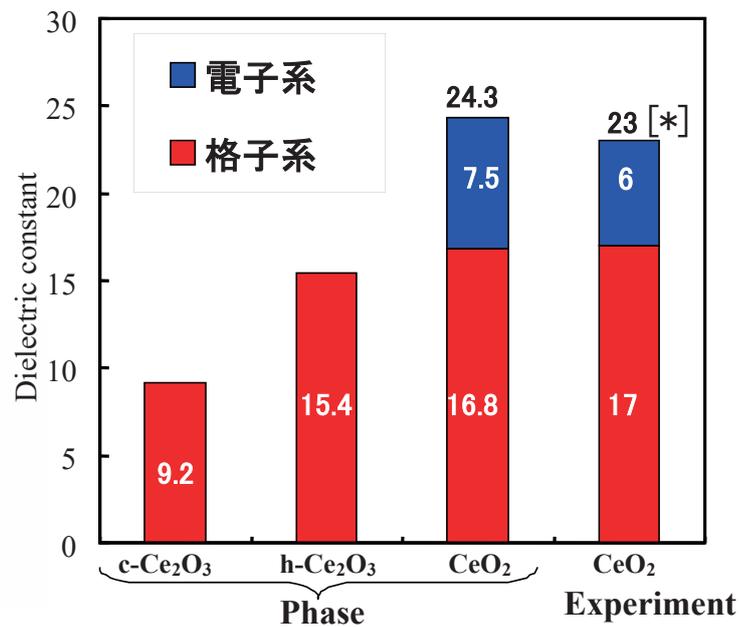
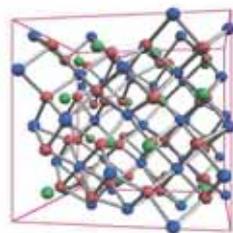
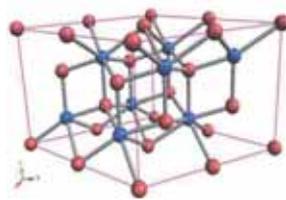
Siの  
フォノン分散



Siのフォノン  
状態密度



# セリウム酸化物の誘電率

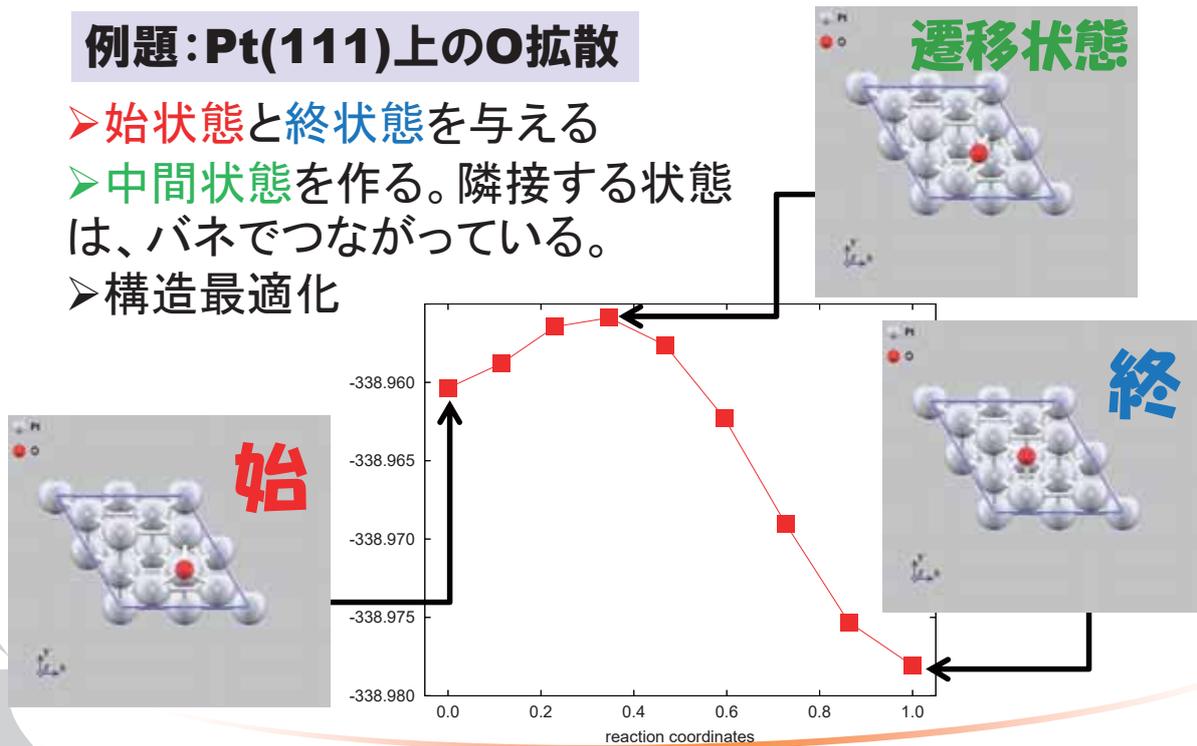


[\*] N. I. Santha et al., J. Am. Ceram. Soc., **87** (2004) 1233.

# Nudged Elastic Band (NEB)法

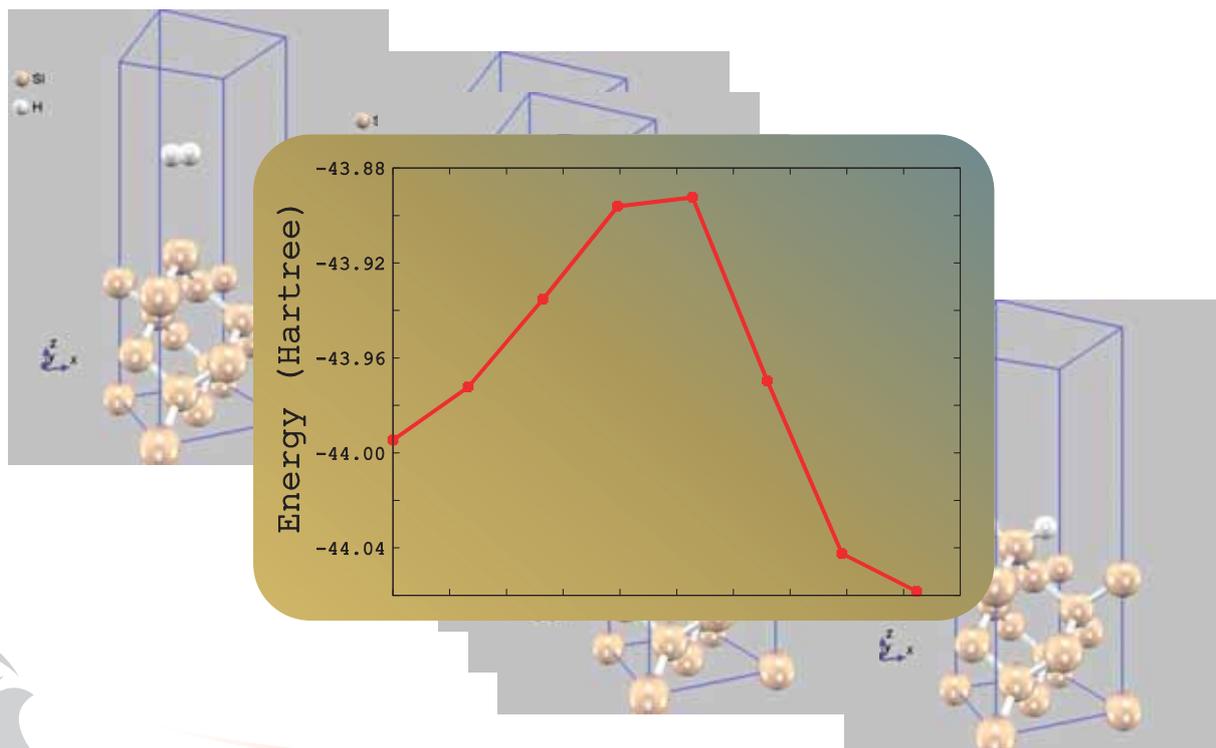
## 例題: Pt(111)上のO拡散

- 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



17

# Si(001)への水素分子の解離吸着



18

## 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)



## 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



# 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 ~)

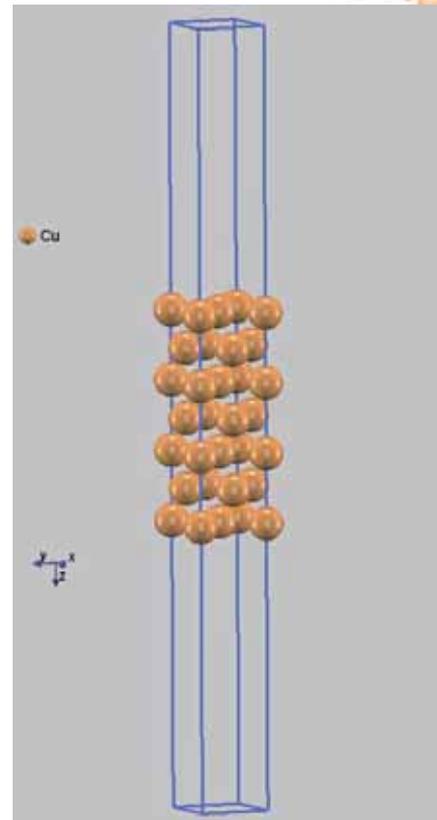
## ▶ 仕事関数

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)

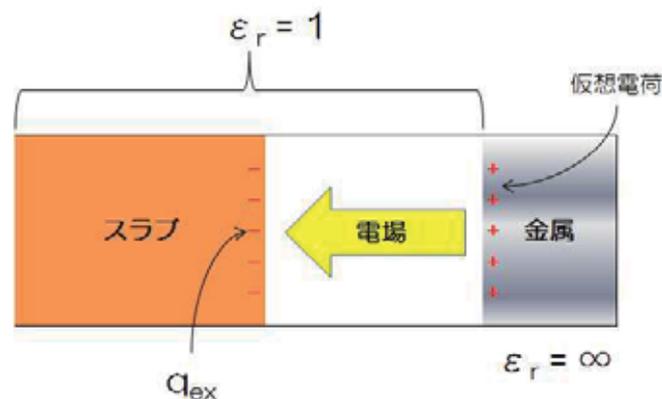
ESM法 / sec	周期系 / sec
240	727

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**



# 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



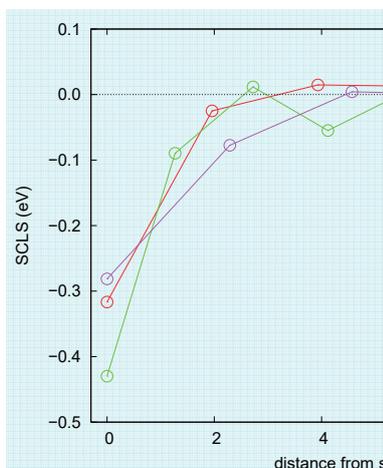
# X線光電子分光 (XPS)

- 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。



23

## XPS計算例: Surface Core-Level Shift



		Advance /PHASE	実験※	全電子計算※
<b>Rh</b>	(110)	-0.71	-0.64	-0.63
	(100)	-0.64	-0.62	-0.64
	(111)	-0.42	-0.50	-0.42
<b>Pd</b>	(110)	-0.43	-0.55	-0.43
	(100)	-0.32	-0.44	-0.33
	(111)	-0.28	-0.28	-0.30

※ Phys. Rev. B 50, 17525 (1994).

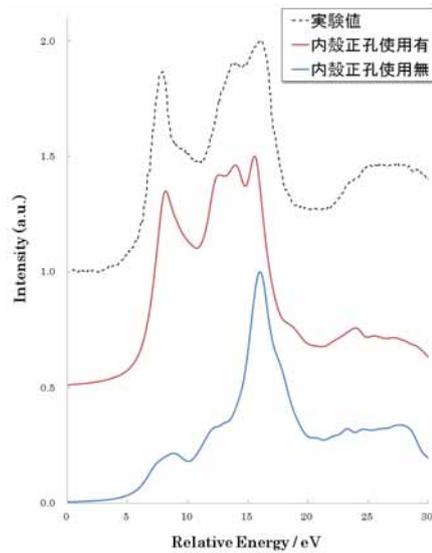
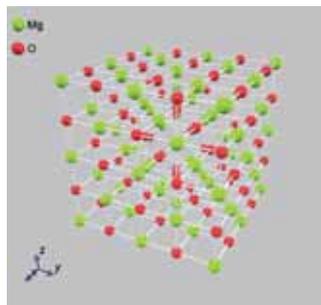
原子種依存性と面方位依存性が正しく求まっている。

# 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

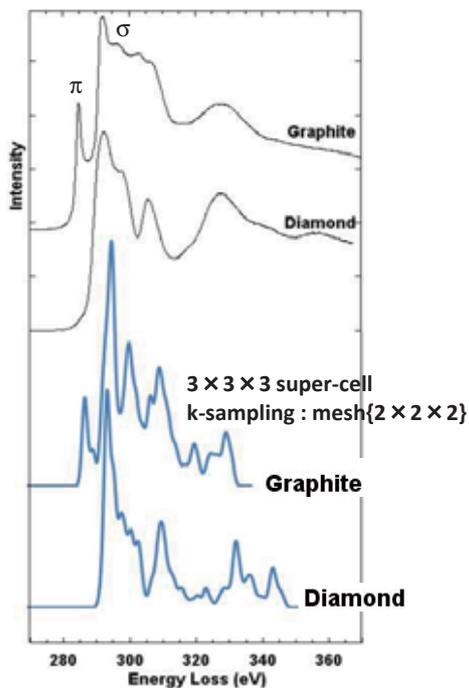
- MgO



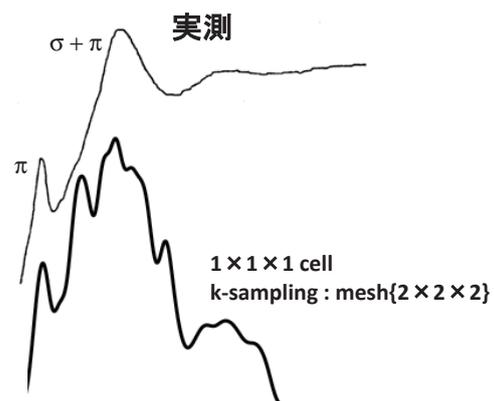
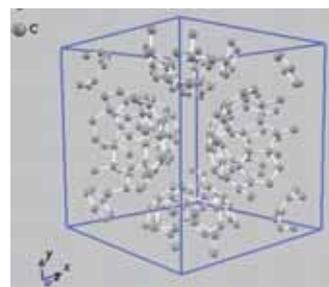
Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

## 炭素のK-edge

- ▶ ダイヤモンド、グラファイト



- フラーレン



Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

# 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

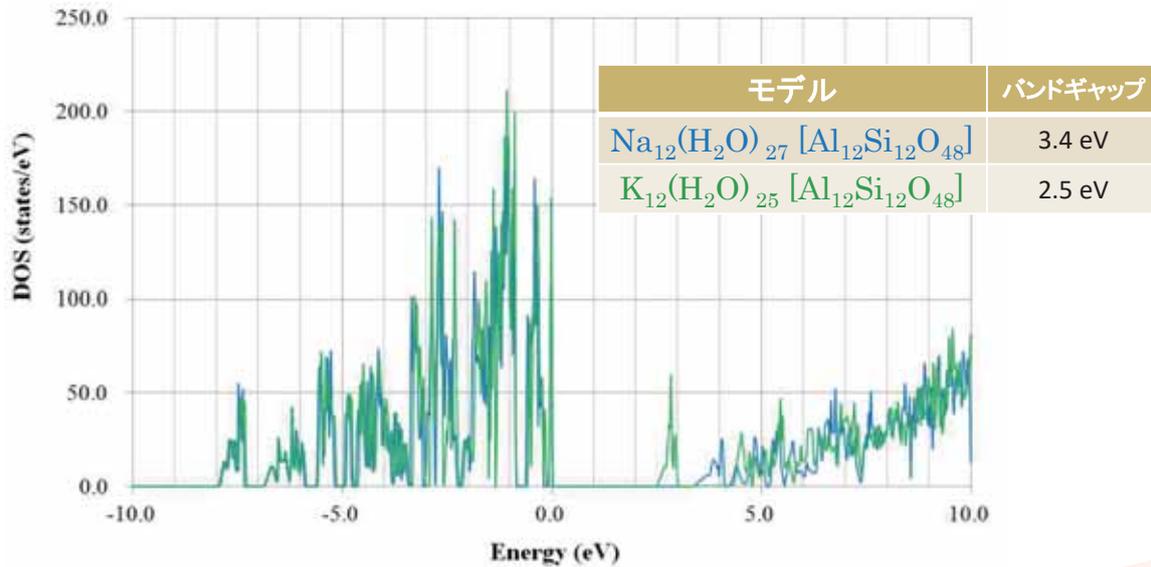
計算値	-4.7 kcal/mol
実験値	-4.9 kcal/mol

# 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 ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

## 正式対応プラットフォーム

- **Windows版 (64bit)**  
Windows 7以上
- **Linux版(AMD64/Intel 64)**  
RedHat Enterprise Linux 6以上  
並列数に無制限

単体PCに限定。

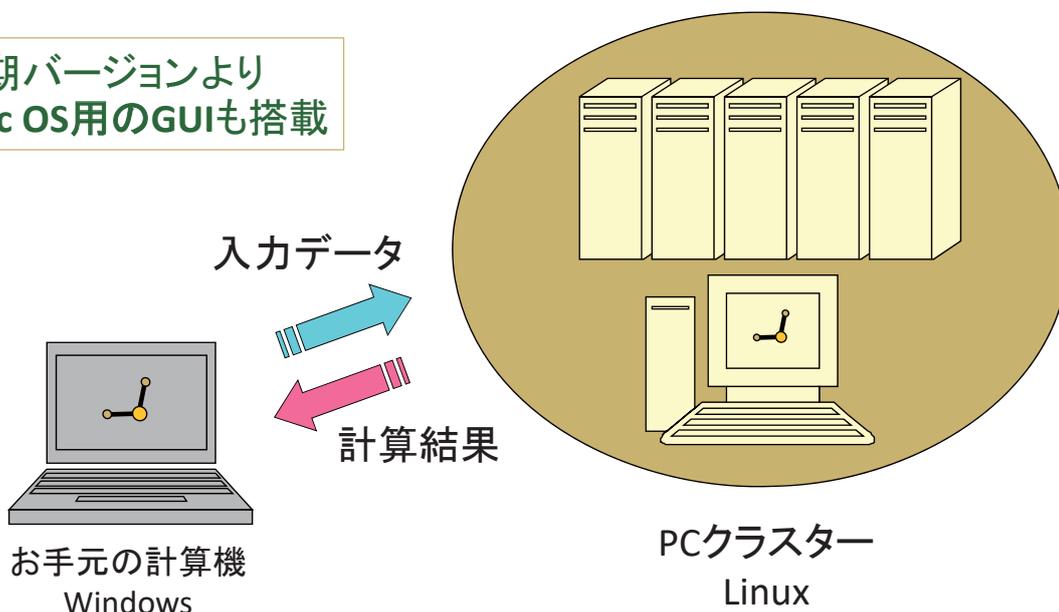
PCクラスターで  
並列計算できます。

スパコンで実績多数

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

# Linux版にはWindows用のGUIが 付属しています

次期バージョンより  
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

Windows, Linuxで自由に使える

### □ 設定の自由度が大きい

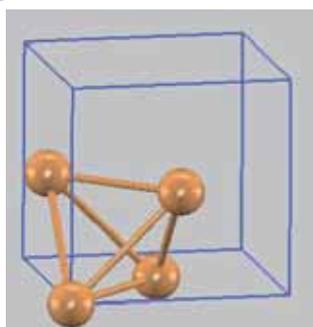
高精細対応(文字サイズ調整)

外観(配色)の変更

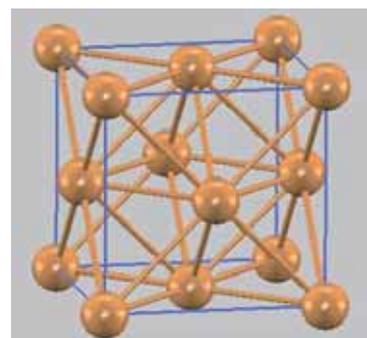
転送ファイル設定

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)

The screenshot shows the Advance/PHASE software interface. On the left is a 'projects' tree with a yellow label 'サンプル' (Sample) pointing to the 'Si2' folder. The main area is divided into four panels: 'AtomicConfigurationViewer of chr.cube' showing a 3D charge density plot with a yellow label '電荷密度' (Charge density); 'AtomicConfigurationViewer of bym.data' showing a 3D force vector plot with a yellow label '力のVector表示' (Force vector display); a 'Band structure' plot with a yellow label 'バンド構造' (Band structure); and a 'Brillouin zone' plot with a yellow label 'Brillouin zone'. At the bottom, a status bar contains 'INFO - Welcome to Advance/PHASE!', 'INFO - Copyright(c) 2005-2018 AdvanceSoft corp.', a yellow label '操作に関するヒント' (Hint regarding operation), and 'clear log' and 'save log' buttons.

Copyright ©2019 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

# 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。



# 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、実空間第一原理計算、第一原理計算、GUI～  
2019年4月26日（金）  
アドバンスソフト株式会社

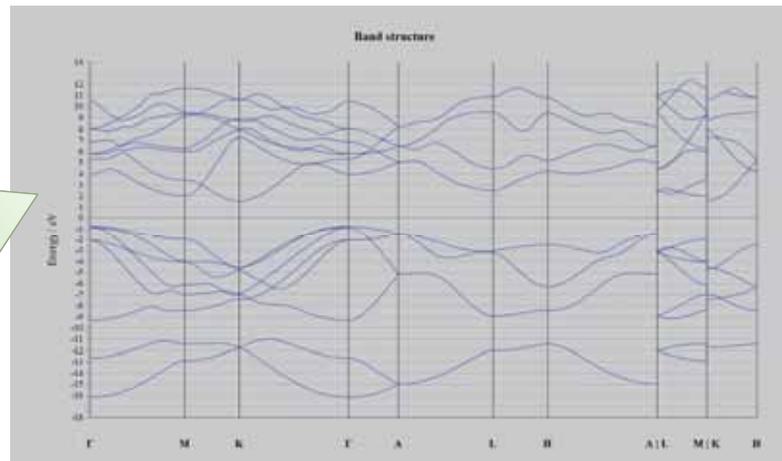
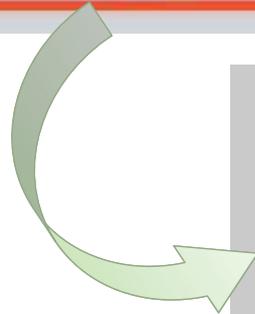


## Advance/NanoLabo

- ✓ 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。**



# 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  $\leftrightarrow$  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、NEB 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)



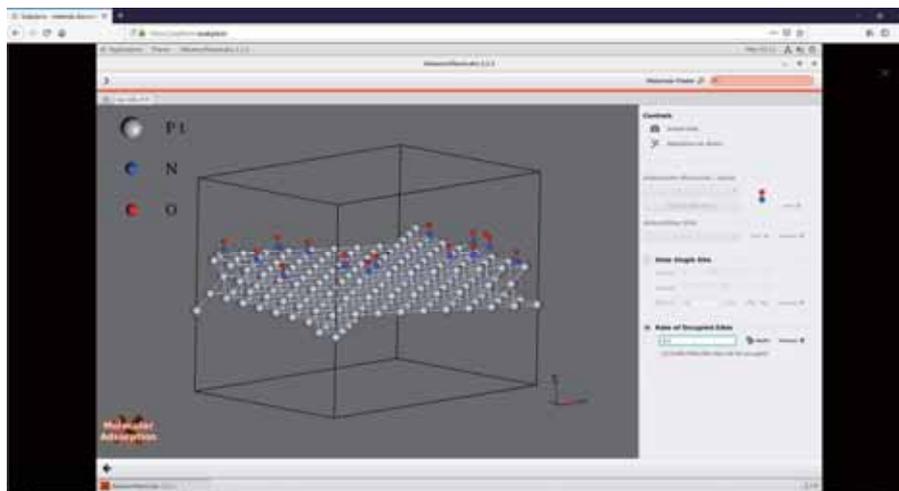
### 3. 計算結果の可視化

- 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
- NEBイメージの残像表示 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 田口 浩一

## ナノ材料シミュレーションセミナー

～古典分子動力学、実空間第一原理計算、第一原理計算、GUI～

2019年4月26日（金）

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、RSDFTなど)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。

LAMMPSは米国エネルギー省のSandia National Laboratoriesで開発されたOSSでありGPL条項の下で自由に配布されています。<https://lammps.sandia.gov/>  
NWChemは米バシフィック・ノースウェスト国立研究所のEnvironment Molecular Science Laboratoryで開発されたOSSでありECL条項の下で自由に配布されています。<http://www.nwchem-sw.org/>

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。