

オンラインセミナー AI では見抜けない本質！ 第一原理計算×専門家サポートで 材料開発の課題解決

2025年 8月 5日(火)開催

プログラム

1. アドバンスソフト株式会社のご紹介 主催者あいさつ 1
2. 本セミナーの趣旨について 5
3. 材料設計における第一原理計算：AI・自動化の進化で高まる知見と洞察の真価 10
4. 第一原理計算コンサルティングサービスのご紹介 33
5. 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE 最新動向：高速化、自動化と機械学習 37
6. 関連サービスのご紹介 56



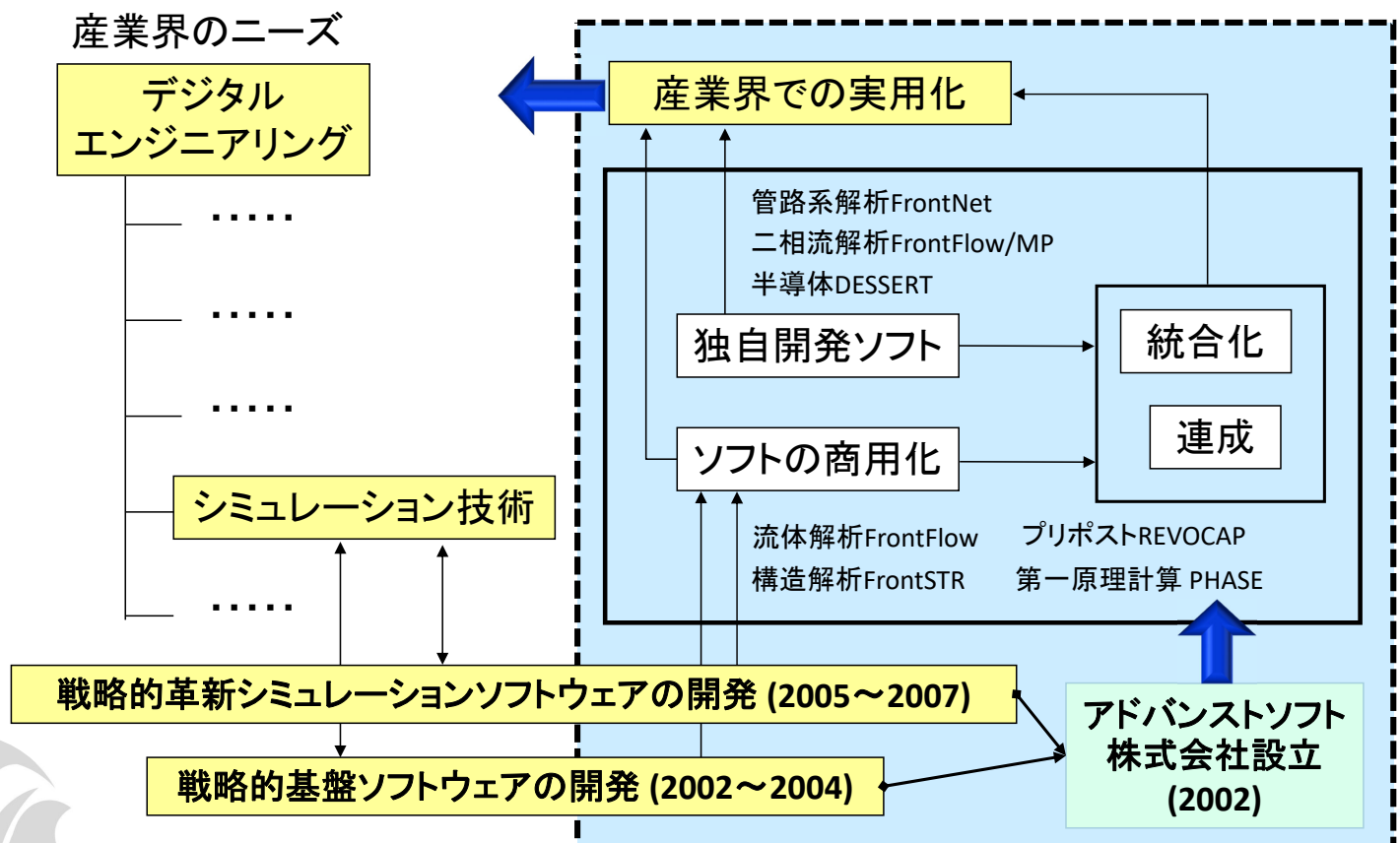
アドバンスソフト株式会社のご紹介

AI では見抜けない本質！
第一原理計算×専門家サポートで材料開発の課題解決
2025年8月5日（火）
アドバンスソフト株式会社

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

1

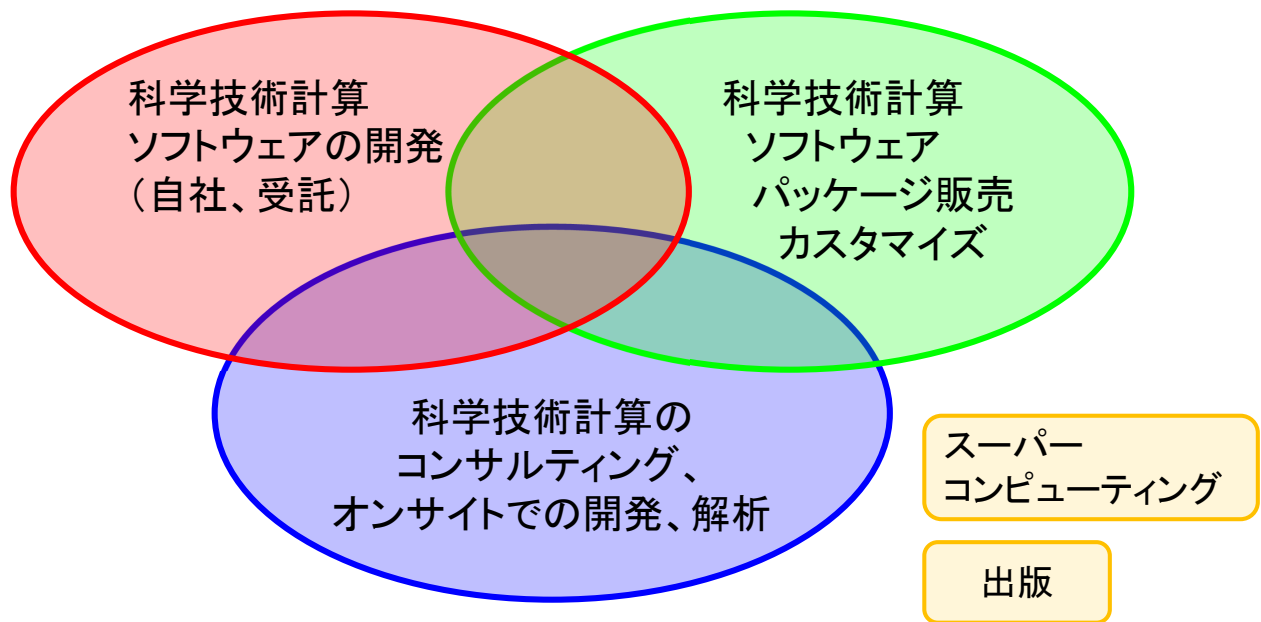
アドバンスソフトとは



Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

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。

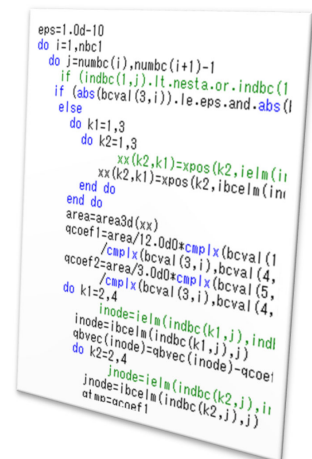
アドバンスソフトの特徴

- ・ シミュレーションソフトウェアの開発力
 - 自社でソースコードを所有し、事業化
 - ニーズに対し自社でカスタマイズが可能
 - 計算原理とその限界を熟知した技術者

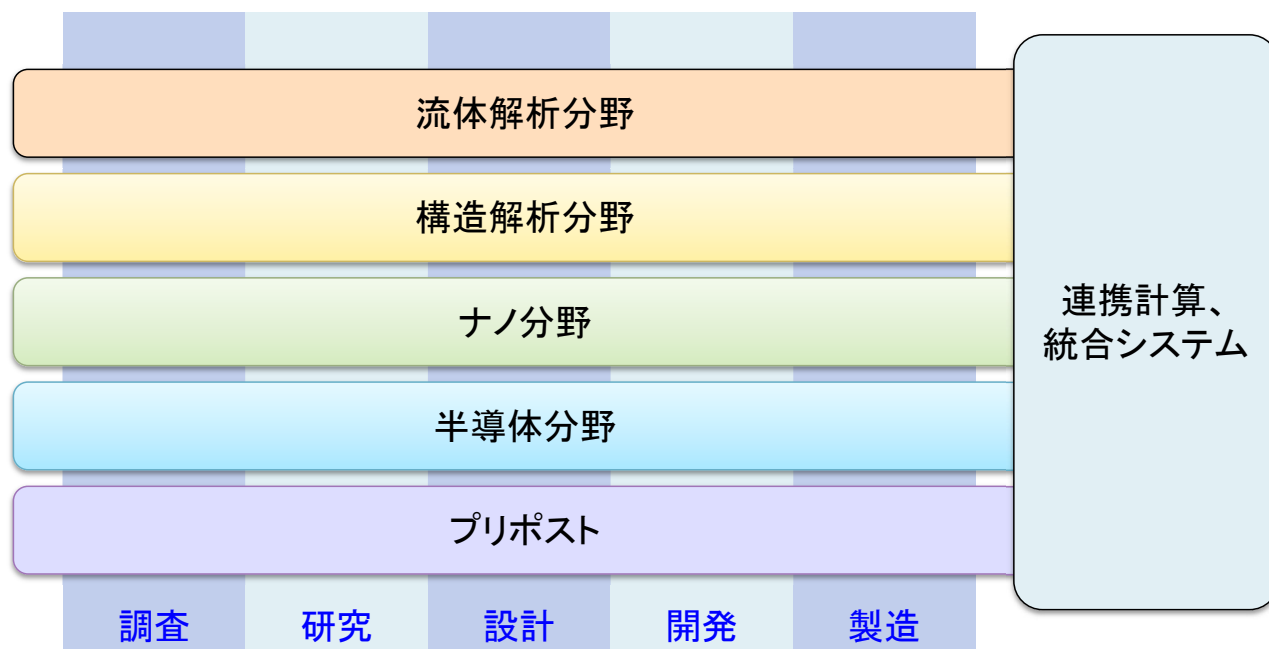


✓ 幅広い分野

- ナノから構造・流体分野の幅広い技術
- 製造業・原子力から材料・半導体産業までの幅広いニーズに対応
- お客様に多種多様な提案が可能



事業分野



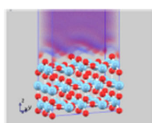
産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、科学技術計算によるソリューションをご提供します。

ソフトウェアご紹介

第一原理計算ソフトウェア

Advance/PHASE

密度汎関数理論に基づき、物質の性質を原子・分子レベルから解析する第一原理計算ソフトウェアです。



ナノ材料

GUI 付属

ナノ材料解析統合 GUI

Advance/NanoLabo

材料解析ソフトウェア QuantumESPRESSO と LAMMPS に対応した統合 GUI です。



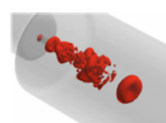
ナノ材料

プリポスト

流体解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/red

非圧縮性から圧縮性流れまで、広範囲で複雑な流れに対応した汎用 3 次元流体解析ソフトウェアです。

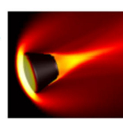


流体

圧縮性流体解析ソルバー

Advance/FOCUS-i

非構造格子に対応した圧縮性流体解析ソルバーです。特に超音速や超音速の流れに適しており、高い並列化効率で計算出来ます。

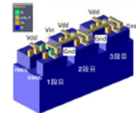


流体

大規模 3 次元 TCAD システム

Advance/TCAD

超微細半導体デバイスからパワーデバイスまで、高度な機能と使いやすい GUI を備えた 3 次元 TCAD システムです。



半導体デバイス

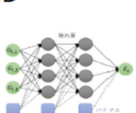
GUI 付属

ニューラルネットワーク

分子動力学システム

Advance/NeuralMD

Neural Network Potential に基づいた分子動力学のソフトウェアです。第一原理計算の結果を教師データとして分子力場を作成します。



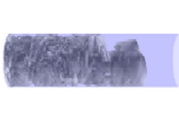
ナノ材料

AI・機械学習

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

沸騰と凝縮を伴う気液二相流の流動特性や伝熱特性を 3 次元で解析するソフトウェアです。



流体

管路系流体過渡解析ソフトウェア

Advance/FrontNet

配管や流体機器から成る管路系内流体に対する 1 次元過渡解析の実用的なソフトウェアです。



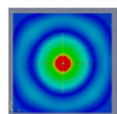
流体

GUI 付属

大規模電磁波解析ソフトウェア

Advance/ParallelWave

マクスウェル方程式を FDTD 法で 3 次元に解く電磁波解析ソフトウェアです。アンテナの電波解析から光の干渉や回折を考慮した光波解析まで幅広く適用できます。

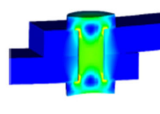


光波・電磁波

構造解析ソフトウェア

Advance/FrontSTR

固体の変形や熱伝導を、有限要素法を用いた 3 次元で解析するソフトウェアです。

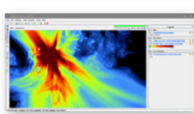


構造

大気拡散影響予測システム

Advance/Emerg

大気拡散物質の挙動予測と影響評価のためのソフトウェアシステムです。



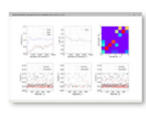
流体

GUI 付属

深層学習用ツール

Advance/iMacle

機械学習のうち、ニューラルネットワークによる深層学習に特化、最小限の機能に絞り込んだ比較的軽いツールです。

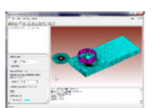


AI・機械学習

汎用プリポストプロセッサ

Advance/REVOCAP

解析の一連の流れをスムーズに行う事を実現した汎用プリポストプロセッサです。

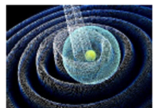


プリポスト

音響解析ソフトウェア

Advance/FrontNoise

環境騒音、機器内の共振等における音場を有限要素法を用いた 3 次元で解析するソフトウェアです。



音響

自社による開発（国プロ含む）

開発チームによる質の高いサポートサービス

カスタマイズや機能追加も応相談

並列数無制限（追加料金なし）

ソフトウェアの解析事例

解析事例Webページをご覧ください。

アドバンスソフト 事例集

検索

<http://case.advancesoft.jp>

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

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

facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中

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

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



本セミナーの趣旨について ～AI時代における専門技術者の役割～

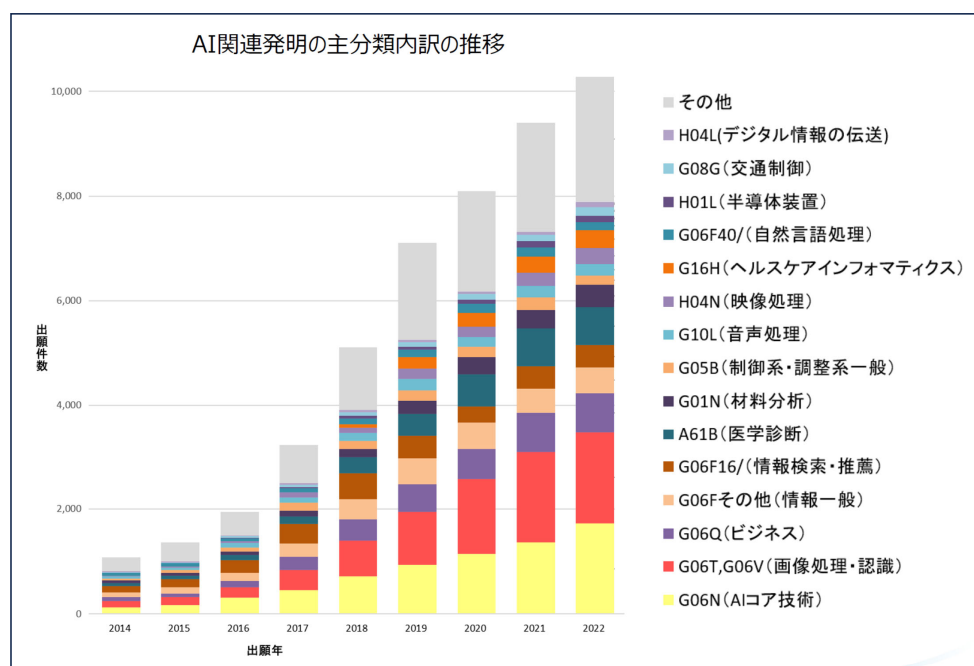
第一事業部 原田 昌紀

AI では見抜けない本質！
第一原理計算×専門家サポートで材料開発の課題解決
2025年8月5日（火）
アドバンスソフト株式会社

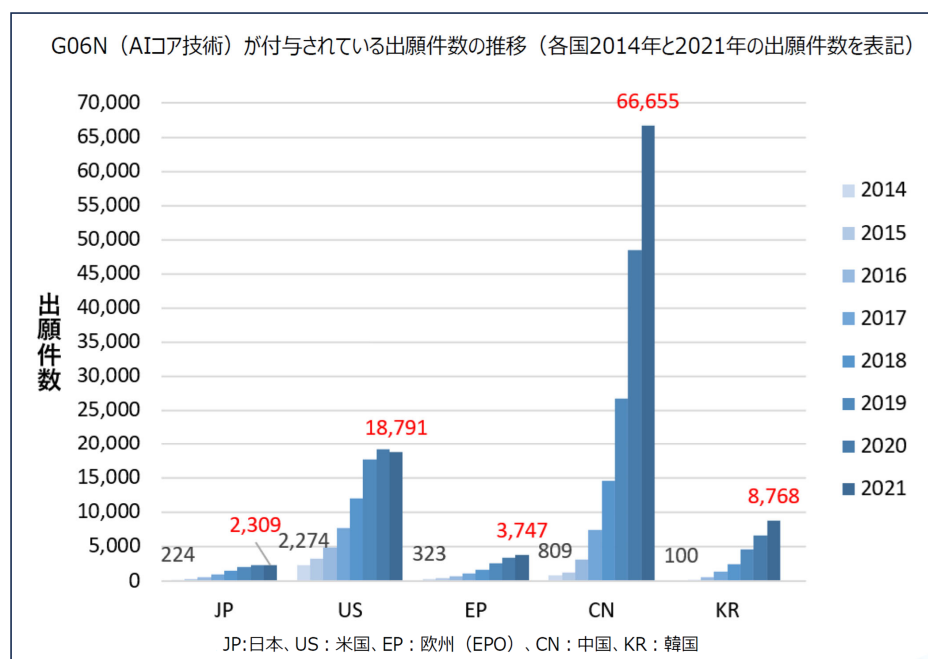
以下のような課題はありませんか？

- シミュレーションを導入したのに活用しきれていない。
- AIを導入したがその結果をどこまで信用していいのかわからない。
- 計算結果をどう開発に活かせばいいかわからない。

研究開発におけるAIの活用に関して（国内のAI関連特許出願件数の推移）

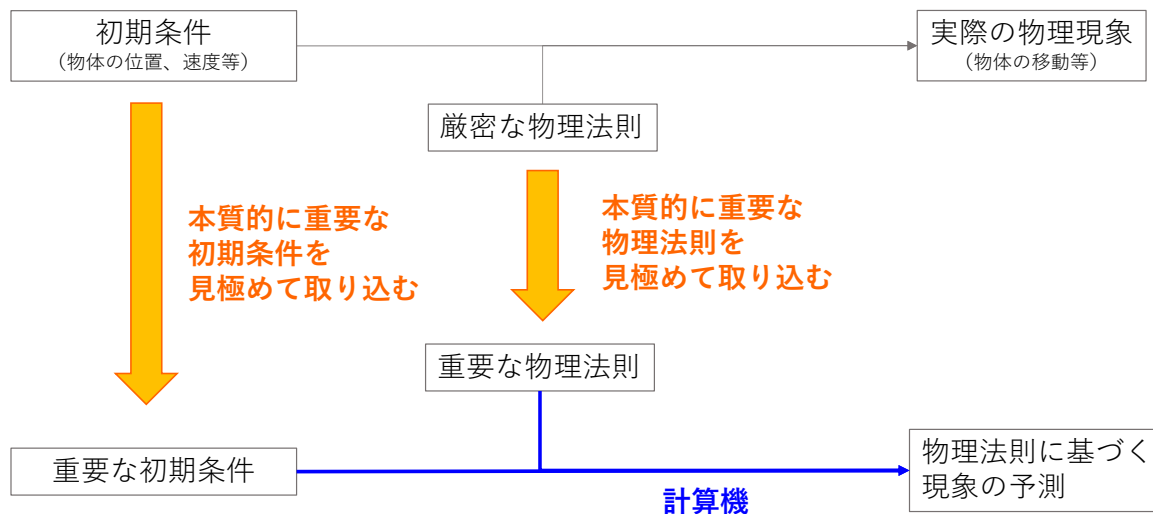


AIのコア技術に関する海外との比較（各国の特許出願件数の推移）

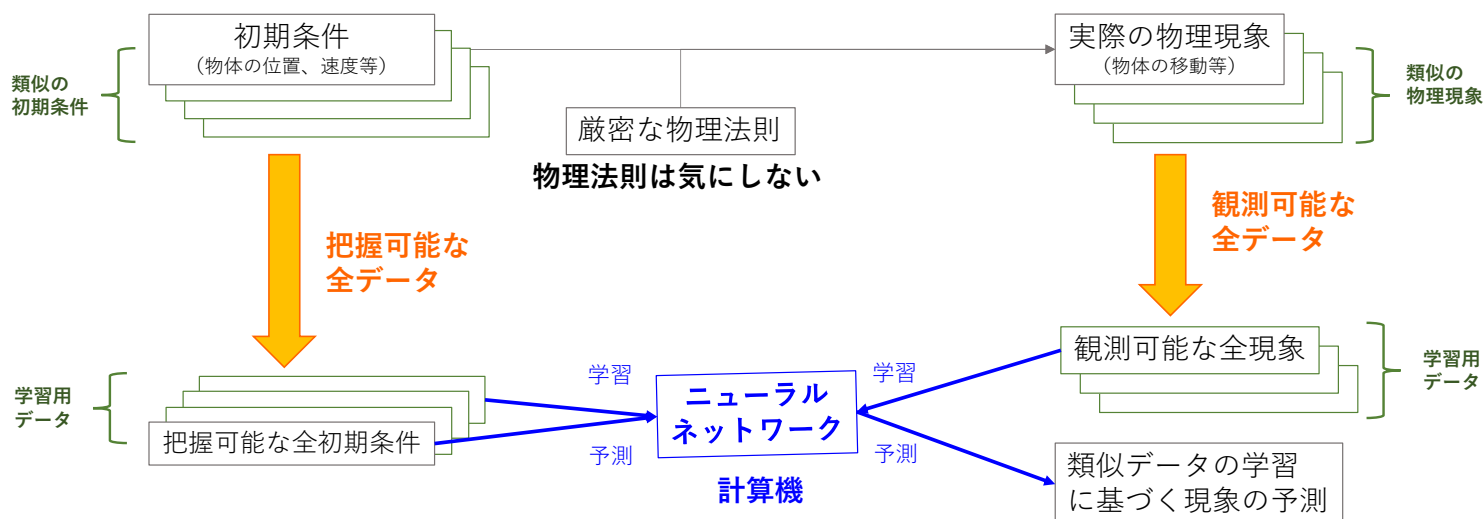


※特許庁「2024年度 AI関連発明の出願状況調査 結果概要」から抜粋して引用
https://www.jpo.go.jp/system/patent/gaiyo/sesaku/ai/document/ai_shutsugan_chosa/gaiyo.pdf
 ※データベースが異なるため前頁の数値とは厳密には一致しない

物理現象のシミュレーションにおいて技術者と計算機が行ってきたこと



物理現象のAI予測において技術者と計算機が行っていること



物理現象の予測におけるシミュレーションとAIの比較

特徴	シミュレーション	AI（人工知能）
基盤	物理法則、数学モデル	データ、統計的パターン
アプローチ	演繹的（ルール→結果）	帰納的（既知データで学習→結果）
入力	モデルのパラメータ、初期条件	大量のデータ
出力	物理現象の予測 （+物理法則の適用状況）	物理現象の予測 （+統計的ばらつき、入力変数の重要度）
得意なことや利点	• 手法の厳密性 • メカニズムの解明 • 学習データは不要	• 複雑な初期条件や現象 • 大量データ処理 • 技術者の育成が容易
苦手なことや課題	• 複雑な現象のモデル化 • 法則が不明な現象の予測 • 技術者の育成に時間を要する	• 学習データに依存 • ブラックボックス化 • 因果関係の解明が困難

企業の研究開発におけるAI利用で考えられるシナリオ

段階	考えられるシナリオ
担当者の作業効率向上 担当者の技術力の低下	• AIを使用することで、各担当者が短期間で複雑な解析が可能になる。 • AIが「ブラックボックス」であるため、段々とAIの出力結果を鵜呑みにしがちになり、その背後にある物理法則や動作原理を深く理解しようとしなくなっていく。
企業として利益率の向上 企業全体の技術力の低下	• 各担当者の作業効率が上がることで企業全体として生産性がアップ • 専門技術者に頼る必要がなくなり、採用や教育などの経費が削減できる。 • 専門技術の習得や物理的洞察力の強化といった時間を要し短期的利益につながらない作業は段々と軽視されるようになり、専門技術者が削減される。
次の技術開発への投資促進 イノベーションの停滞	• 利益率が上がることで、次の研究開発への投資を迅速に進めることができる。 • 従来、専門技術者の洞察や経験から生まれてきた革新的なアイデアやブレイクスルーが生まれなくなる。
競合他社との技術的差別化の喪失	• 既知のデータから学習したAIからもユニークな技術は生まれにくい。 • 競合他社と類似のAIツールや学習データに依存してきたため競争優位性を築けない

**本セミナーを通じて専門技術者の役割を
再考いただく機会になれば幸いです。**



材料設計における第一原理計算

-AI・自動化の進化で高まる知見と洞察の真価-

技術第1部 岡崎 一行

AI では見抜けない本質！
第一原理計算×専門家サポートで材料開発の課題解決
2025年8月5日（火）
アドバンスソフト株式会社

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

1



目次

- 第一原理計算とは
 - 第一原理計算の理論
- 材料開発と第一原理計算
 - マテリアルズ・インフォマティクス
 - シミュレーションの自動化
 - データベース
- 事例紹介
 - ちょっとして経験を基に

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

- 10 -

2



第一原理計算とは

・ 広義

- 原子番号以外の経験的なパラメータを用いずに、物理学の第一原理だけに基づいて、物質の性質を電子・原子レベルで理解するための計算方法
 - ・ 物質の電子状態を計算機内で精度良く再現
 - ➡ 物質の性質を決定する要因や機構の理解
 - ➡ 未知物質の予測
 - ➡ より望ましい性質をもつ物質の設計
- 物理学の第一原理
 - ・ 古典力学
 - ・ 電磁気学
 - ・ 統計力学
 - ・ 量子力学



基礎理論

- ・ Born-Oppenheimer近似
- ・ 密度汎関数理論 (DFT)
 - 交換・相関エネルギー汎関数
 - 📖 知りたい物性値によって使用する汎関数が異なる
- ・ 擬ポテンシャル法
- ・ 基底関数展開
 - 📖 計算したい系によって、適した基底関数が異なる
- ・ 密度汎関数理論
 - 原子・分子の密度汎関数法 丸善出版
 - 密度汎関数理論入門 吉岡書店
 - 密度汎関数法の基礎 講談社
- ・ 電子状態計算
 - 物質の電子状態 (上・下) 丸善出版
 - 動かして理解する第一原理電子状態計算 森北出版
 - 平面波基底の第一原理計算法 内田老鶴圃
 - 量子化学計算ソフトGAMESSとFireflyの使い方 化学工業日報社

金属酸化物の擬ポテンシャル問題

- TiO_2 のTi
 - 単体の金属Tiなら、擬ポテンシャルの価電子は $4s^23d^2$ で十分
 - 酸化物 TiO_2 では、 $4s^23d^2$ を価電子とすると、 Ti^{4+} のイオンではTi近傍の電子は取り扱えていない
 - セミコアである $3p^6$ まで価電子として取り扱った方が良い
- Ga_2O_3 のGa
 - 単体の金属Gaなら、擬ポテンシャルの価電子は $4s^24p^1$ で十分
 - 酸化物 Ga_2O_3 では、 $4s^24p^1$ を価電子とすると、 Ga^{3+} のイオンではGa近傍の電子は取り扱えていない
 - セミコアである $3d^{10}$ まで価電子として取り扱った方が良い

分子の吸着に対する 交換・相関エネルギー汎関数

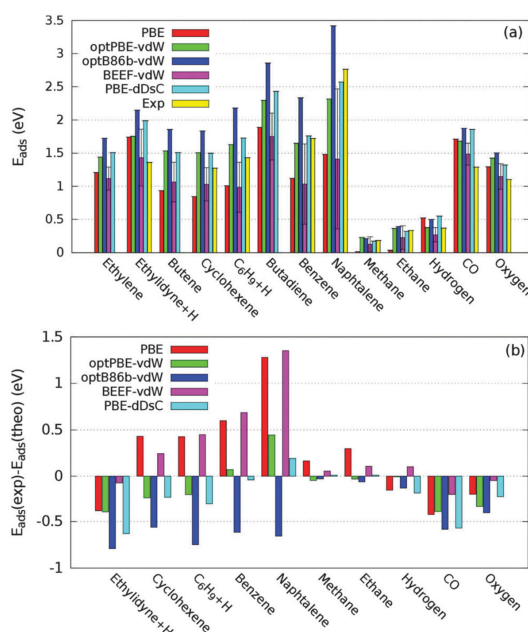


Fig. 3 (top) Adsorption energy (eV) on Pt(111) at 1/9 ML for the considered systems, calculated with the 5 considered functionals. The experimental value (see text for evaluation method) is indicated in yellow when available. (bottom) Adsorption energy deviation between experimental data and calculated results for the studied systems on Pt(111) for the 5 considered functionals.

- 交換・相関エネルギー汎関数によって、吸着エネルギーの精度が異なるので、慎重さが必要

Cite this: Phys. Chem. Chem. Phys., 2015, 17, 28921



第一原理計算(電子状態計算) 計算エンジン

- 擬ポテンシャル法
 - Advance/PHASE (有償、弊社製品)
 - VASP (有償、有償のGUI(MedeA)あり)
 - CASTEP (学術利用は無償、企業は有償、有償のGUI(Materials Studio)あり)
 - QuantumEspresso (無償、弊社に有償のGUI(Advance/NanoLabo)あり)
 - SIESTA (無償)
 - ABINIT (無償)
- 全電子計算
 - WIEN2k (有償)
 - Hi-LAPW
- ガウシアン基底
 - GAUSSIAN (有償)
 - GAMeSS (無償)
 - NWCHEM (無償)



どの電子状態計算エンジンを選択するか

- 本当のところ
 - 第一原理計算では、設定した系(構造)の電子状態とエネルギーが計算できる
- では、材料設計に役立つ物性値は得られないのか？
 - 得られた電子状態やエネルギーを加工(解析)することで、必要な物性値を得ることができる
- 電子状態の計算エンジンを含むパッケージによって、機能が異なるので、選択する必要がある
 - 📖 判断が難しい
- また、主に計算したい系が孤立系のみからなるか、周期系を含むかにより基底関数で計算エンジンを選ぶ必要がある



目次

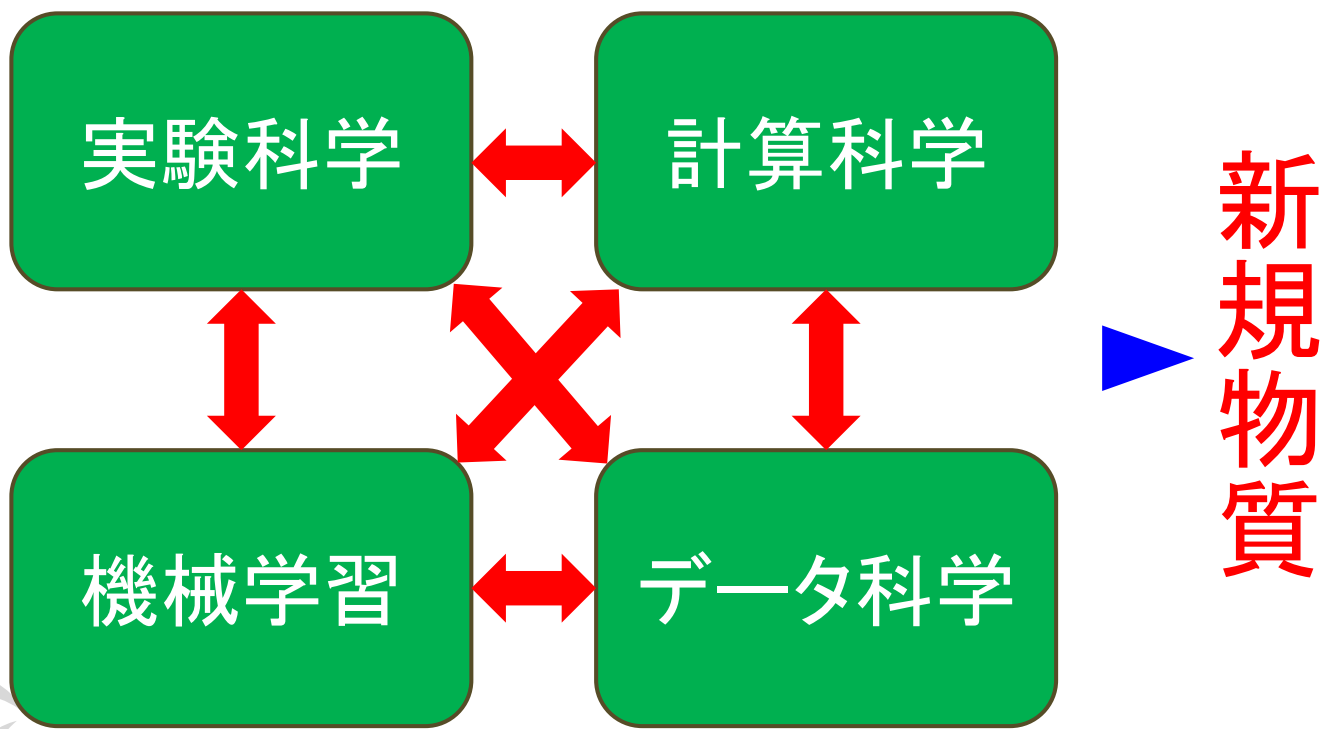
- ・ 第一原理計算とは
 - － 第一原理計算の理論
- ・ 材料開発と第一原理計算
 - － マテリアルズ・インフォマティクス
 - － シミュレーションの自動化
- ・ 事例紹介
 - － ちょっとして経験を基に



マテリアルズ・インフォマティクス

- ・ 過去の材料実験・シミュレーションデータを利用した効率的な探索アルゴリズムによって、よりスピーディーに新素材を開発・商品化する
 - － それぞれの材料の基礎データと、実験から得たデータをもとにして「材料基礎データのパラメータaが、素材の性能を決めるのでは？」という予測をAIで立てる
 - － 「材料Aと材料Bを組み合わせると一番性能が良くなるのでは？」と予測をAIで立て、実際に実験で作ってみる

マテリアルズ・インフォマティクス

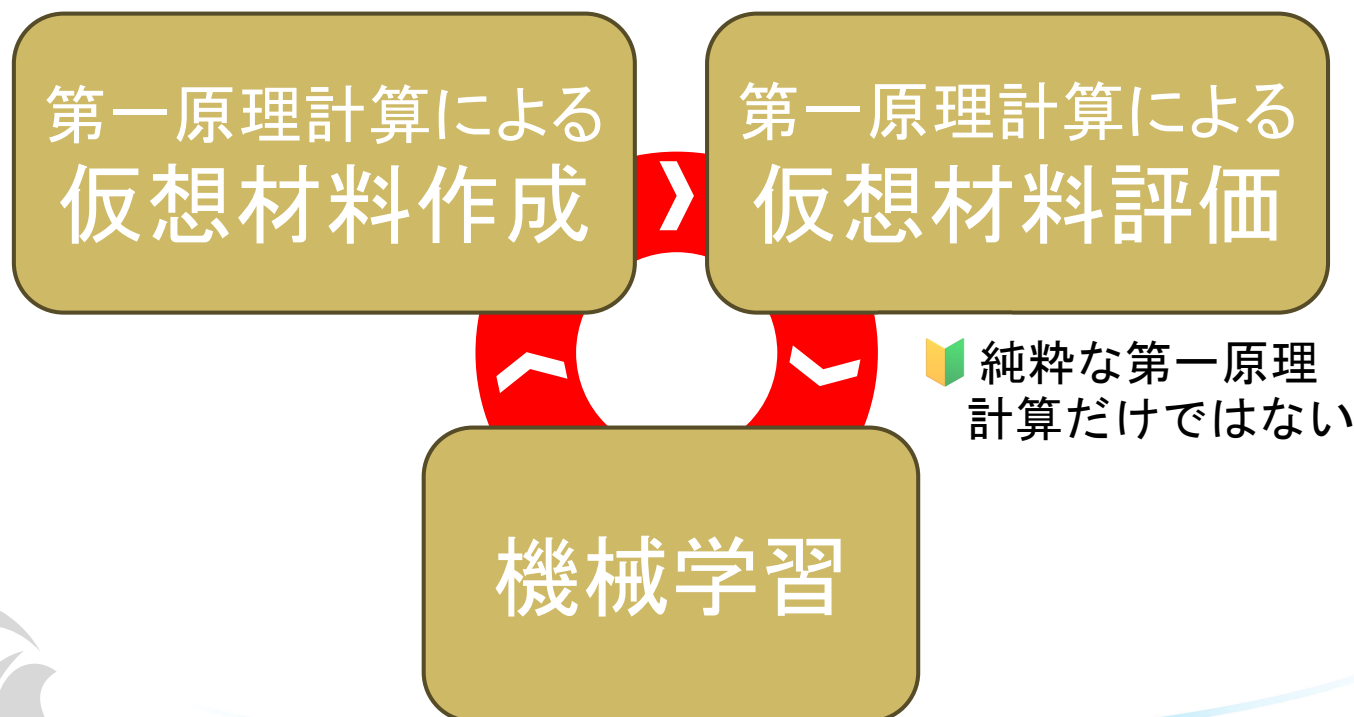


第一原理計算の重要性

- 近年のAI(人工知能)の需要により、第一原理計算の重要性が増している
 - 実験ではカバーできない領域のデータ補填
 - 現実には作成できない構造も計算機上なら作成可能
- 第一原理計算は万能ではない
 - 複雑で理解することが困難な問題に対して、その解決方法の一つとなりえる非常に大きなポテンシャルを持っている
- 計算機技術の発展やネットワーク環境の充実により、誰もが手軽に第一原理計算に触れられるようになってきている
- 今後、ますます第一原理計算が活用される場面は多くなる



第一原理計算だけの マテリアルズ・インフォマティクス シミュレーションの自動化



仮想材料評価

- 構造(結晶構造 or 分子構造)があれば、電子状態計算(第一原理計算)はできる
 - どのような計算エンジンを用いるか？
 - どのような基底関数を選ぶか？
 - どのような交換・相関エネルギー汎関数を選ぶか？
 - どのような擬ポテンシャルを選ぶか？
- 電子状態計算からどのような解析をすれば、やりたい材料評価ができるか
 - 先に述べたように、第一原理計算で得られるものは、基底状態のエネルギーと電子状態
 - 解析(加工)することによって、種々の物性値が得られる
 - パッケージに含まれた機能か？
 - フリーのツールが配布されているか？
 - 新たにツールを作成する必要があるか？

専門家の知見があれば・・・

AI時代の到来

AIは私たちの社会に急速に浸透しつつある

大規模言語モデルの例

- どんな質問でも、答えが返ってくる時代へ。
- Google Gemini, OpenAI ChatGPTなど、多様なAIが開発されている。
- 対話だけでなく、文書・グラフ・画像・動画・プログラム等の生成・編集にも目覚ましいパフォーマンスを発揮。
- **最新鋭のAIは、名門大学の入試にも突破！**



材料設計において、AI・自動化が進んでいる。

※ AIにより生成した概念図

AIの現状 (Google Geminiの例)

得意なこと 📁

提供したファイルからのデータ抽出・変換

→ **非常に高い信頼性**

注意が必要なこと 🗨️

AIが自ら生成する情報・データ・文献

→ 常に「誤りがあるかも」という心構え

AIの役割: 確率に基づいて情報を「生成」するクリエイター

- **巨大な学習データが源泉:** 知識は「真実」ではなく、ネット上の膨大な情報の **統計的パターン**。
- **ハルシネーション (幻覚) の存在:** もっともらしい **嘘を自信満々に生成** してしまうことがある。
- **情報の鮮度と偏り:** 知識はある時点で止まっており、最新情報や学習データのバイアスに注意が必要。

AIの回答は、恣意な加工や架空な話が出る場面も。特に専門分野では、その真偽を見抜くことが極めて重要です。

生成された情報は、必ず人間によるファクトチェックが必要！

文法ミスはネイティブスピーカーが、そして**材料開発は専門知識と洞察**が不可欠です。



第一原理計算: 材料開発の強力なツール

- 第一原理計算は、経験的なパラメータを必要とせず、物質の電子状態を基本原理から解き明かす計算手法です。
- 現代では、優れたソフトウェアとGUI・自動化ツールの進化により、専門家でなくとも「誰でも」計算を実行できるツールになっています。

関連論文は...

年間 数万本

...が発表され、材料科学の発展に不可欠な存在です。

実験と並ぶ、あるいは実験を先導するための重要な研究手法として確立されているため、これだけ多くの論文が発表されています。



第一原理計算の「難しい」ところ

- ? 計算モデルが**大きすぎて**、計算ができない
- ? 計算時間が**長すぎて**、終わらない
- ? 計算の**精度**が出ない
- ? 計算結果の**見方**が分からない
- ? 計算結果と実験の**結び**つかない、.....

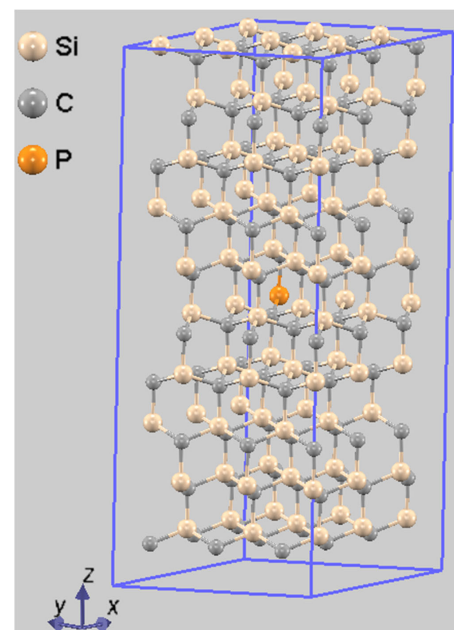
これらの課題の本質を、**専門知識**がいかに解決するか、**解析事例**と共に見ていきましょう。

計算モデルが「大きすぎる」問題

課題: 固体中の希薄な点欠陥 (例: 濃度 1/1000以下)
いきなり数千原子のモデルで計算するのは非現実的です。

専門的なアプローチ

1. モデルの構築: まずは高濃度（計算可能な小規模セル）で振る舞いを定性的に考察。
2. 物理的妥当性の確保: スーパーセル法では不純物が人工的に高濃度で配列するため、格子定数を最適化すると現実と乖離する可能性があります。母材の**格子定数を実験値などに固定**し、バルク中に孤立した不純物という物理的に妥当な状況をモデル化することが重要です。
3. 定量的な計算: 有限サイズでの計算結果から、希薄極限での欠陥形成エネルギーを外挿して算出。



事例2: 第一原理MD

計算時間が「長すぎる」問題

課題: 第一原理分子動力学(MD)シミュレーション

第一原理MDは、静的計算と異なり明確な「収束」の概念がありません。エネルギーは常に揺らいでおり、「いつ終わるか」の判断が困難です。

専門的な視点

MDシミュレーションの本質は、統計平均を取ること
で物性を評価することにあります。

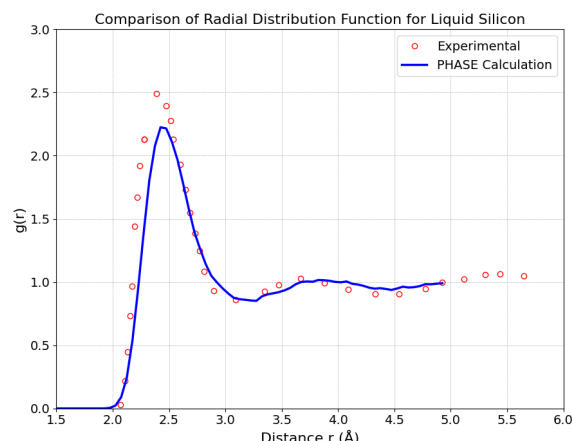
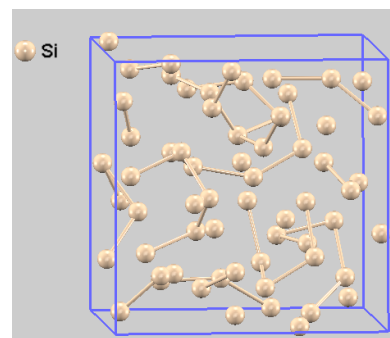
十分なシミュレーション時間を確保し、物理量が安定した平均値を示すことを確認することが不可欠です。

例: 液体シリコンのシミュレーション

- 十分な統計平均から動径分布関数を計算することで、液体Siが**金属的**な振る舞いを示すことを正確に再現できます。

$g(r)$ の第一谷を多項式フィッティングで決定し、最近接配位数を**6.93**と算出しました。

実験のRDFに対するフィッティングで得られた配位数が**6.88**です。



MD計算のコスト削減

課題: 現実的な時間内に、十分な統計精度を得たい

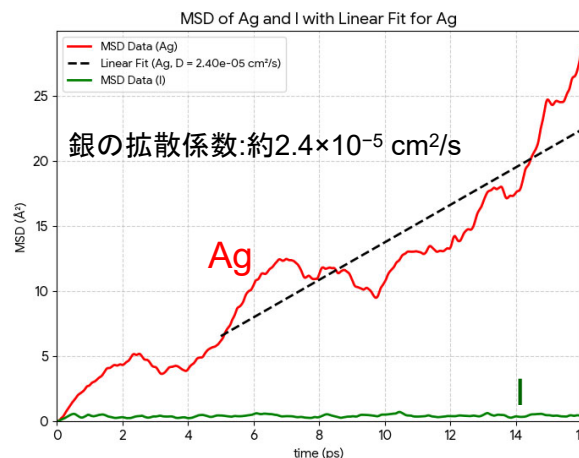
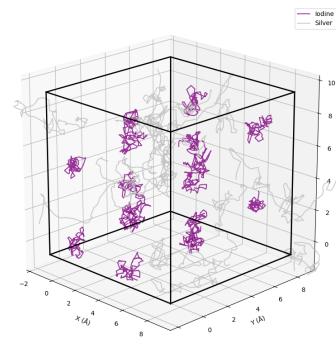
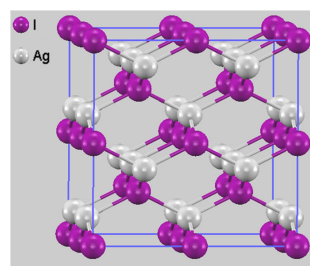
計算コストの削減は、**物理的な考察**に基づいて慎重に行う必要があります。

解析事例: 超イオン伝導体 AgI

- **Time Stepの調整:** 原子の振動周期を考慮し、破綻しない範囲で可能な限り大きな値に設定。
- **カットオフエネルギーの抑制:** 議論したい物理量への影響を評価しつつ、必要最低限の値に設定。重い原子の場合は、

重い原子は、軽い原子に比べて

- ① 波動関数の空間変化が緩やかで、
 - ② 原子の振動周期が長い、
- という特徴があります。そのため、それぞれ比較的小さな**カットオフエネルギー**と長い**時間刻み**を用いても、原子の挙動を物理的に妥当な範囲で追跡することが可能



事例3: 磁気異方性エネルギー

計算精度が「出ない」問題

課題: 磁気異方性エネルギー(MAE)の計算

MAE (meVオーダー) が、全エネルギー(数千eVオーダー)に比べて**100万分の1以下**と極めて小さい値であるため。

膨大な数値の中から、この微小なエネルギー差を安定して求めるには、計算手法に極めて高い精度と安定性が要求されます。

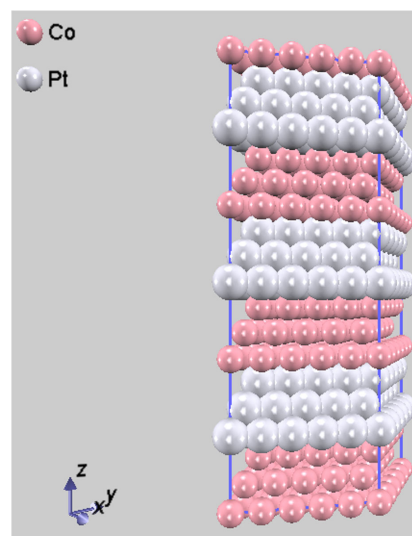
専門的なアプローチ

徹底した収束性確認と相対エネルギーの利用

高精度計算の要件

- 非常に多くのk点メッシュ
- 計算条件の統一: 誤差のキャンセルを狙う。
- 相対エネルギーに着目:

MAE (エネルギー差) は比較的速く収束する傾向があるため、**相対値の収束**を注意深く監視することが重要。



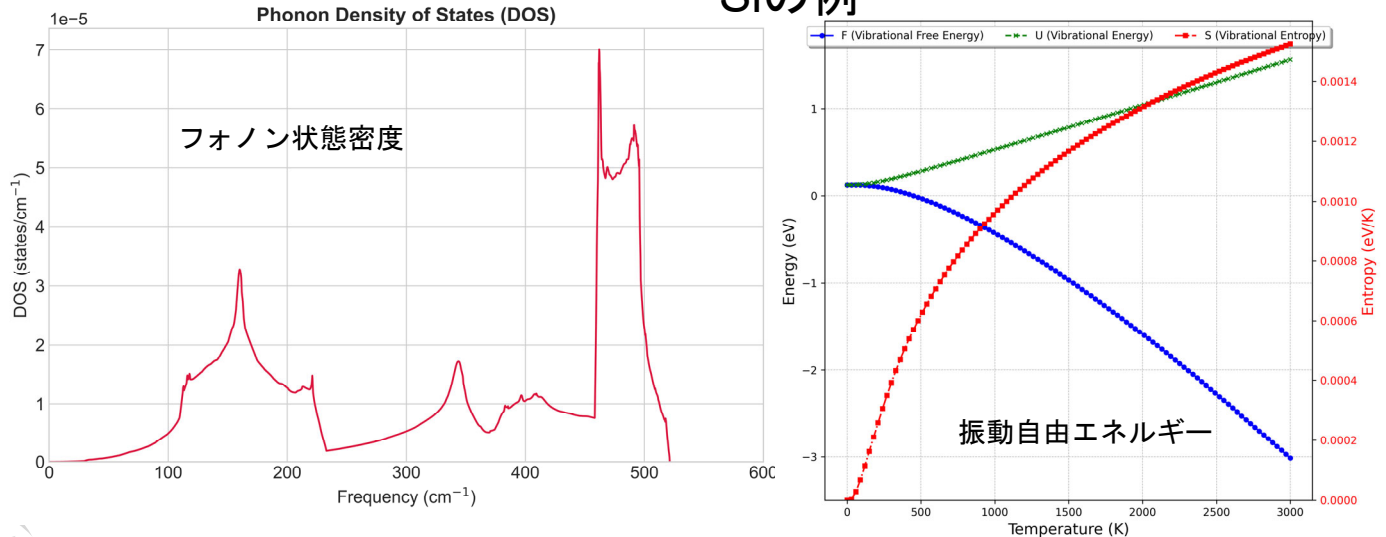
計算例: Co/Pt人工格子
MAE = 5.50 meVという大きな正の値が得られました。これはエネルギー的に垂直方向(z軸)が磁化容易軸であることを意味し、実験事実と一致します。

結果の見方が「分からない」問題

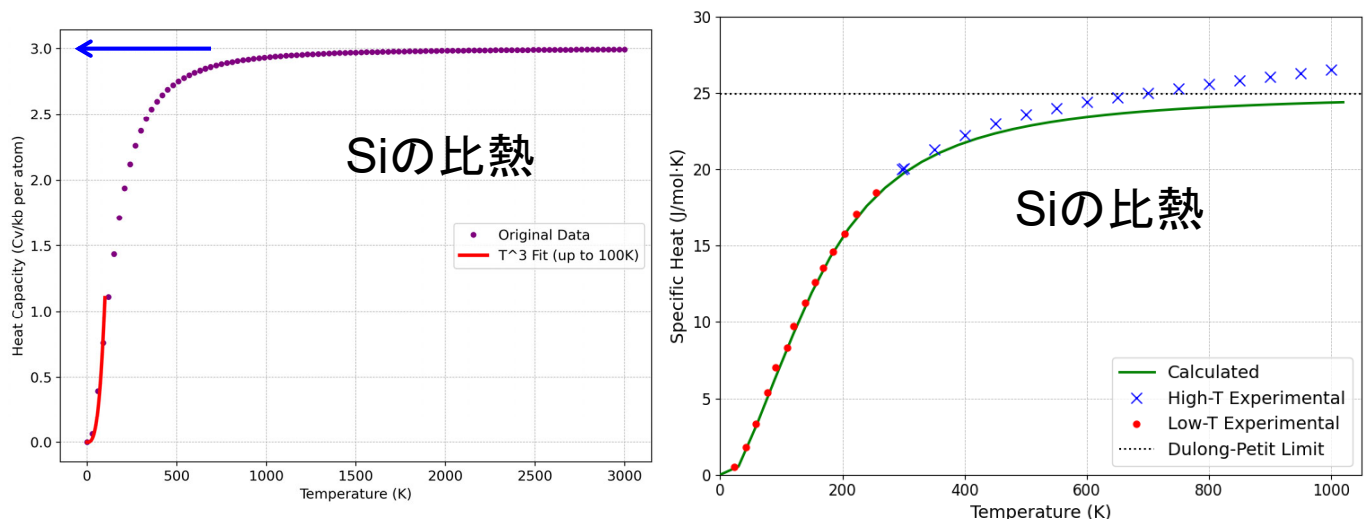
課題: フォノン解析による熱的特性の計算

- 計算は実行でき、グラフも描けた。しかし、この結果は何を意味しているのでしょうか？

Siの例



計算結果の解釈と洞察



計算結果の妥当性評価:

- 低温領域: 比熱(C_v)が T^3 に比例。デバイモデルと一致しており、計算は正しく行われている。
- 高温領域: 一定値に収束。デュロン-プティの法則に漸近しており、調和近似の枠組みでは妥当。

実験との比較から得られる知見:

- 低温: 計算値と実験値がほぼ一致。
- 高温: 実験値が理論極限を超えて増加。これは非調和格子振動や電子励起など、計算の近似を超えた影響を示唆。

物理法則との比較や実験との差異を考察することで、物質のより深い理解に繋がる「洞察」が生まれます。



専門知識がもたらす価値

第一原理計算の課題は、
物理的な妥当性の判断、計算条件の最適化、
そして結果の深い解釈によって乗り越えることが
できます。

次に、より実践的な**計算コスト削減**のテクニック
を見ていきましょう。



コスト削減例1) 格子定数の計算

方針: 計算による最適化を行わず、実験値・文献値を使用する

- 第一原理計算は格子定数を高精度（平均誤差1.5%以内）で予測できます。
常に最適化が必要とは限りません。

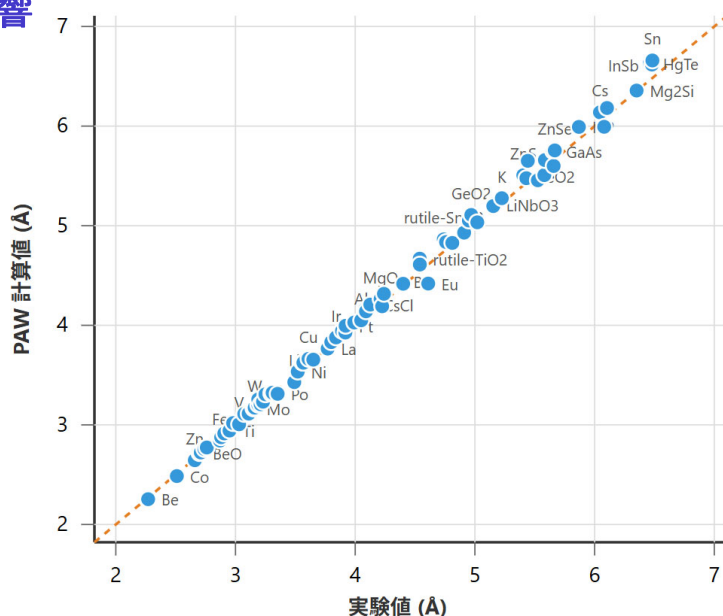
判断基準: 議論したい物性への影響

影響が比較的小さい物性
(実験値の利用が効率的)

- 電子バンド構造
- 状態密度 (DOS)
- 磁気的性質

影響が大きい物性
(理論的な最適化が不可欠)

- 弾性率
- 圧電定数
- (格子歪みを伴う計算全般)



コスト削減例2) 構造最適化の一部省略

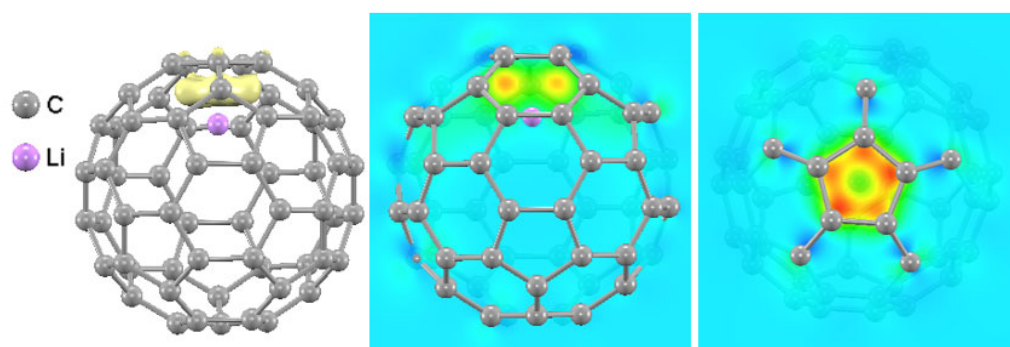
有効なケース

- 表面吸着計算: 基板部分は実験値で固定し、表面近傍と吸着分子の構造のみを緩和。
- 表面吸着計算コストをかけてもメリットが少ない系

Li内包フラーレンの電子状態解析

C₆₀骨格を剛体として固定し、内部のLi原子の座標のみを構造最適化しました。C₆₀はsp²炭素間の強固な共有結合により極めて安定な構造を形成するため、単一のLi原子の内包による構造歪みは無視できるほど小さい。

系の本質的な電子状態を捉えた: Li原子の価電子(2s電子)がC₆₀の最低非占有軌道(LUMO)へ一つ移動し、Li⁺@C₆₀⁻というイオン対が形成



差電子密度分布 $\Delta\rho = \rho(\text{Li@C}_{60}) - \rho(\text{C}_{60})$

コスト削減例3) バンドギャップ補正

課題: 標準的な汎関数(GGA等)はバンドギャップを過小評価する

- 高精度なハイブリッド汎関数は非常に高コストです。

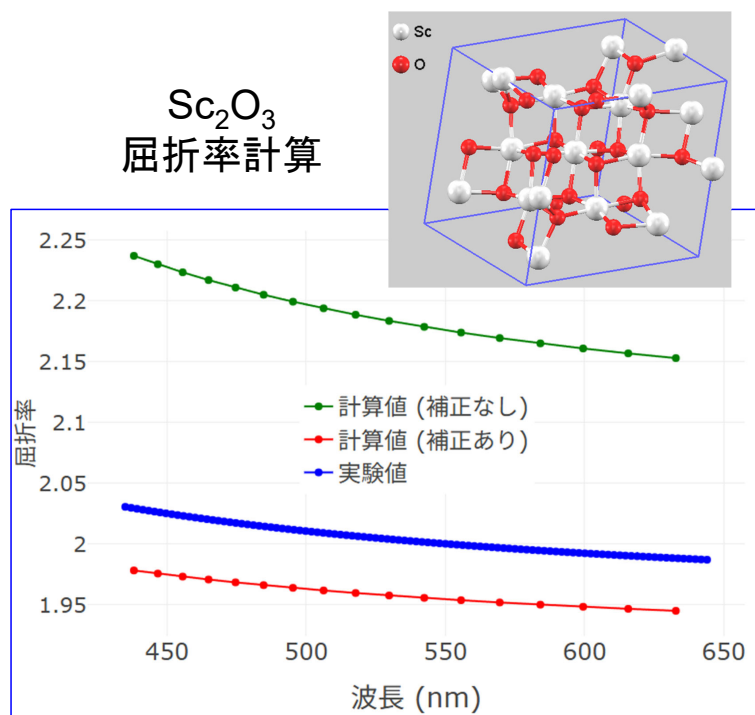
解決策: GGA+U法や経験的な補正

安価なGGA計算をベースとし、補正を加えることで実験的なバンドギャップを再現する。

- GGA+U法: d/f電子の強い相関効果を補正。
- シザーズ補正: バンド構造全体を剛体的にシフト。

光学特性の議論で、コストを抑えつつ妥当な結果を得るために広く用いられる。

Sc₂O₃ 屈折率計算



コスト削減例4) 固液界面

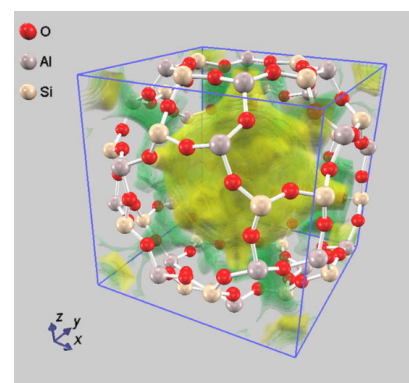
課題: 溶媒効果の取り扱い

- 溶媒分子を全て露わに計算する第一原理MDは、極めて高い計算コストを要します。

解決策: 3D-RISM-SCF法の活用

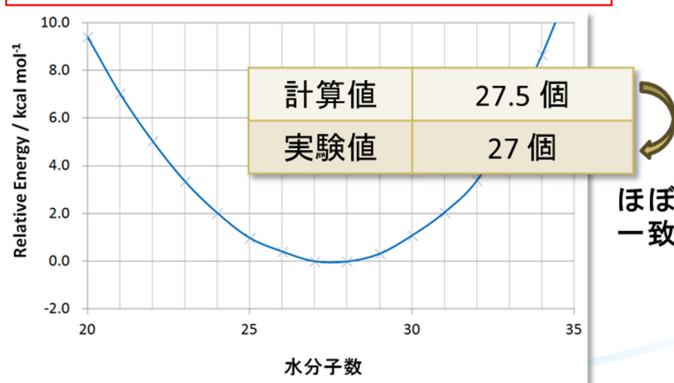
溶媒の分布を統計力学的に扱うことで、溶媒和の効果を第一原理計算に取り込むハイブリッド手法です。

- 溶媒分子を陽に計算しないため、コストを大幅に削減。
- 電極表面での電気化学反応など、固液界面の電子状態解析に強力。



A型ゼオライト

空孔内の水分子数最適化シミュレーション



計算に特に注意が必要な例

課題: 精密な構造最適化が結果を左右する物性

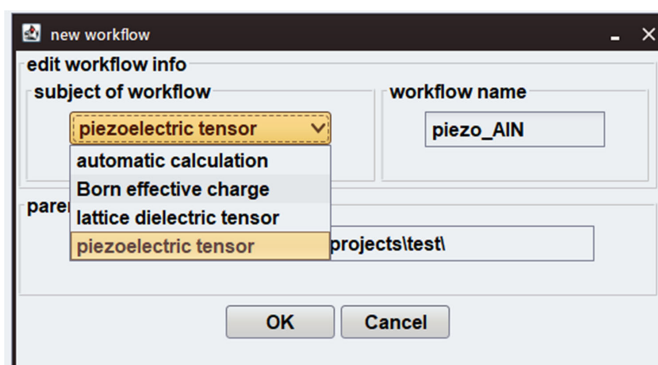
- コスト削減とは逆に、通常以上に厳しい計算条件が要求されるケースです。

フォノン計算

原子間の力定数は、原子の微小変位に対する力の応答です。起点となる平衡構造が不正確だと、全ての計算が台無しになります。エネルギー・力の収束基準を厳しく設定し、精密に最適化された構造から出発することが不可欠です。

圧電定数

圧電定数は、歪みに対する分極応答です。構造最適化が不十分で内部応力が残留していると、正確な値が得られません。フォノン同様、極めて精密な構造最適化が要求されます。



- 圧電定数の計算を含む各ワークフローが自動的に構築でき、便利になります。
- 物性の物理的背景を理解し、適切な計算精度を見極める「洞察力」が重要です。



まとめ

AIと自動化は、第一原理計算を強力にサポートするツールです。
しかし...

- ・ 「何を」計算すべきか？ (物理的に妥当なモデルの設計)
- ・ 「どのように」計算すべきか？ (精度とコストの最適化)
- ・ 「何を意味するか」を読み解くか？ (結果の解釈と洞察)

そして、

- ・ AIの回答に「**幻覚**」があるのか？
- ・ 自動化が**設計通り**に進んでいるのか？

これらの問いに答えるのは、「**専門知識**」と「**洞察**」です。
AI・自動化の進化とともにその真価が高まります。



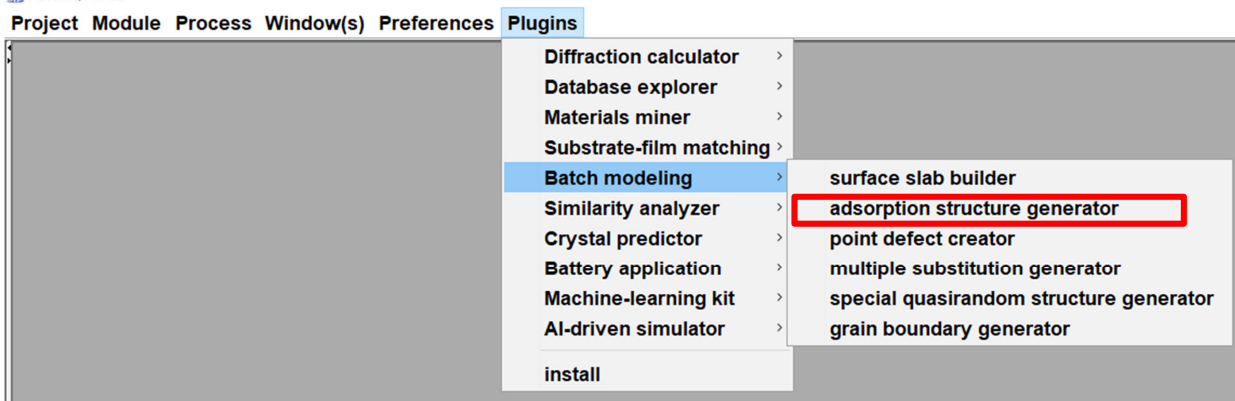
仮想材料の作成

- ・ 計算するための構造の作成は、自動化できる
 - ただし、拘束条件をつけないと、候補の数は発散する
 - ・ 使用する元素の種類、結晶構造など
 - Materials Projectsなどのデータベースを利用すれば、ある程度の拘束は可能
- ・ Advance/PHASEでも、Materials Projectsのデータを参照できる
- ・ Advance/PHASEでは、欠陥構造、吸着構造、界面構造などを**自動で作成できる機能**がある
- ・ ただし、自動生成された構造が**物理的、化学的に意味があるかの判断ができれば、計算コストを下げる**ことができる



Advance/PHASEを用いた 構造の自動作成 - 吸着 -

Advance/PHASE:



Advance/PHASEを用いた 構造の自動作成 - 吸着 -

adsorption structure generator

the crystal structure (bulk)

☒ materials-id (mp-1234) ☐ local file

mp-126

Miller index: 1, 1, 1 surface supercell: 3x3

the adsorbate structure

☐ atom ☒ PubChem CID ☐ local file

281

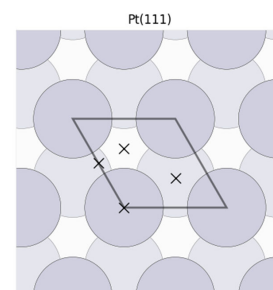
minimum size in Angstrom (optional):

slab 4 vacuum 15

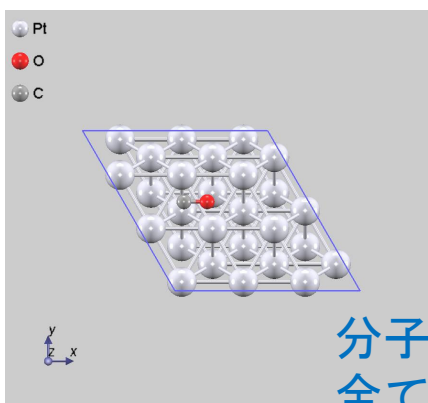
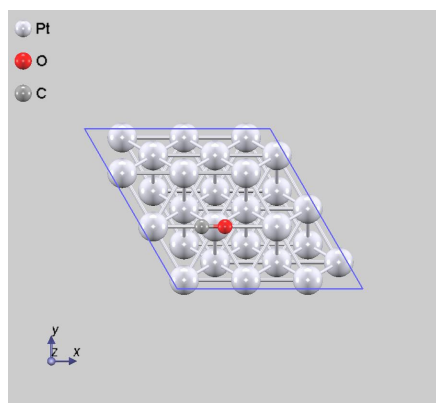
☒ set c perpendicular to surface

maximum normal search (hint): 10

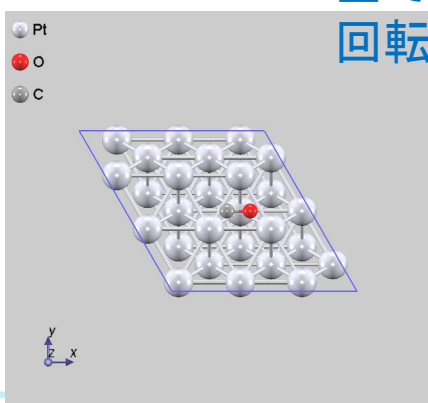
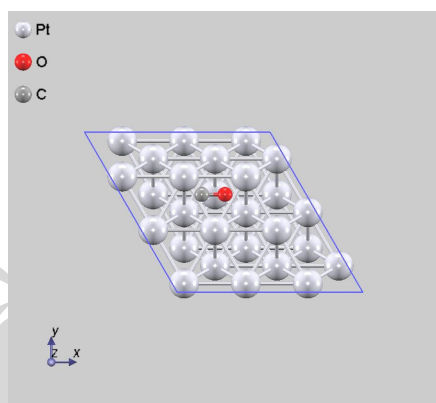
- mp-126 : MaterialsProject で Pt
- (1 1 1)-3x3表面に設定
- 281 : PubChem で CO
- 4Å以上で最小膜厚のスラブ
- 15Åの真空層



Advance/PHASEを用いた 構造の自動作成 - 吸着 -



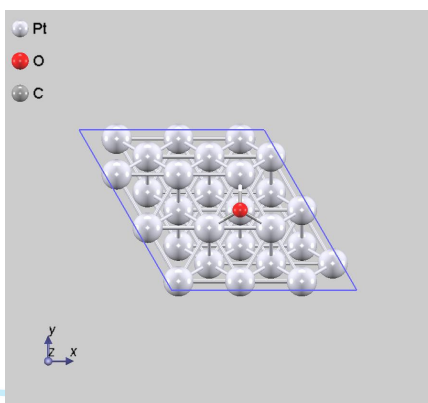
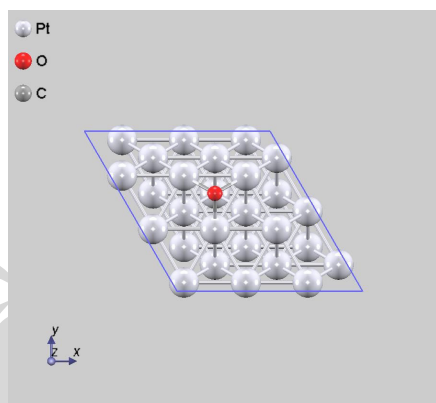
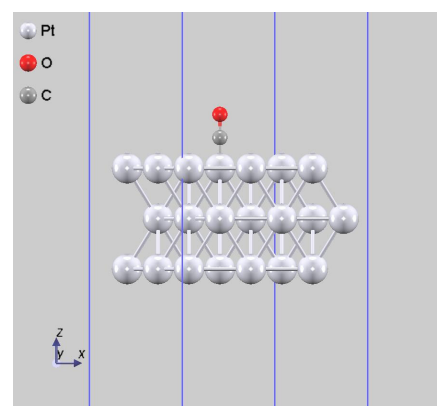
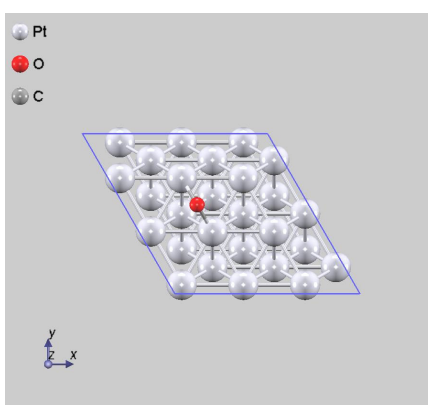
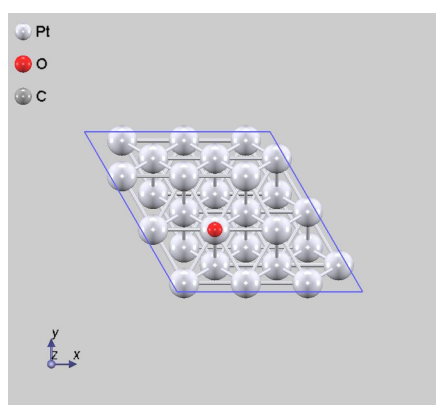
分子軸が表面に平行
全てを考慮するには、90°の
回転は考慮したい



Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

35

Advance/PHASEを用いた 構造の自動作成 - 吸着 -

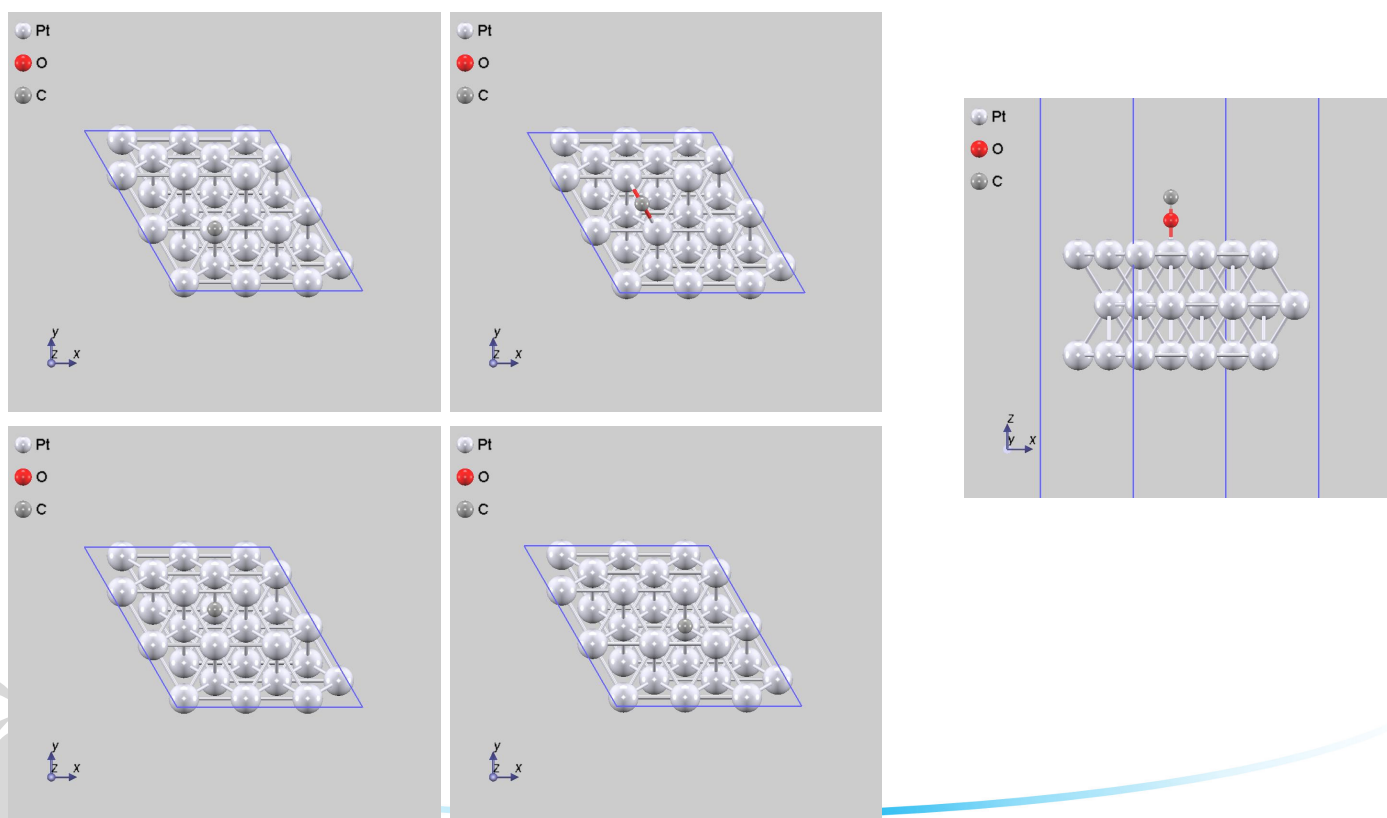


Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

- 27 -

36

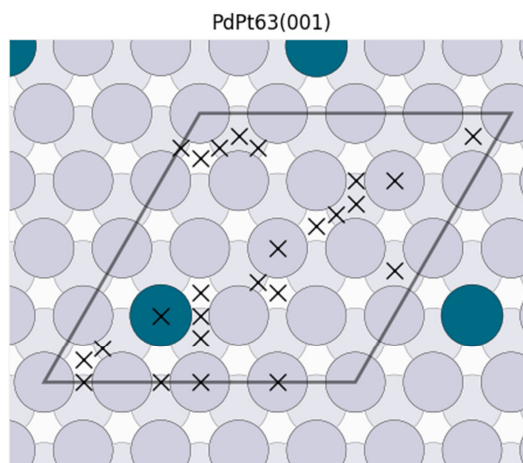
Advance/PHASEを用いた 構造の自動作成 - 吸着 -



37

Advance/PHASEを用いた 構造の自動作成 - 吸着 -

- Pt(1 1 1)表面は、対称性が高く、考慮する吸着点の数が絞られる。
- 添加元素を入れると、一気に考慮すべき吸着点が増加する



38

専門知識の必要性

- 第一原理計算のオペレートそのものは難しくない
 - 方針さえ決まっていれば、入力ファイルを自動生成できる
 - 専門家の知見が必要な部分は、方針を決定するところにある
 - さらに、出てきた結果を解釈するには専門性が必要になる
- 決定すべき方針
 - どのような計算エンジンを用いて第一原理計算を行うか
 - 基底関数、交換・相関エネルギー汎関数、擬ポテンシャルなど
 - 新規材料開発をするために、どのような物性値が必要で、それは第一原理計算で得られたデータから解析できるか？
- 結果の解釈
 - 出てきた大量のデータを整理して、材料開発するだけなら機械学習などを用いて回帰性を見つければ良い場合もある
 - 目的とする物性値と回帰性を見出すべきパラメーターを見抜く
 - なぜ、その材料が良い性能を示すのかを第一原理計算の結果から見出せれば、次の新規材料開発に役立つ

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

39

Au on rutile $\text{TiO}_2(110)$

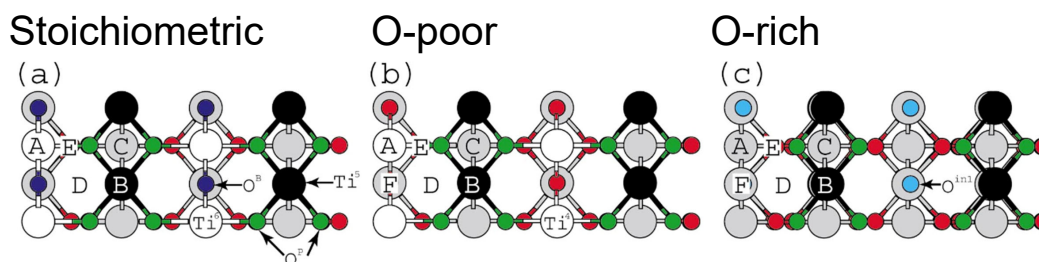


FIG. 1. (Color) Schematic geometry (top view) of the 1×1 cell of the $\text{TiO}_2(110)$ surfaces. Five possible adsorption sites considered in our study are marked from A to E for the stoichiometric surface (a). Six possible adsorption sites are marked from A to F for the Ti-rich (b) and the O-rich surfaces (c). The large open, filled, and gray circles represent the sixfold $\text{Ti}[\text{Ti}^6]$, the fivefold $\text{Ti}[\text{Ti}^5]$, and the inner Ti, respectively. The Ti^6 atoms at the stoichiometric surface become the fourfold $\text{Ti}[\text{Ti}^4]$ atom at Ti-rich surface by removing the bridging O atoms. The small green, blue, and red circles represent the in-plane $[\text{O}^P]$, the bridging O $[\text{O}^B]$, and inner O, respectively. For the O-rich surface, the small light blue circles indicate the O in second layer $[\text{O}^{\text{in}1}]$.

- 表面のストイキオメトリーを指定してやれば、現在なら考慮する吸着点は自動生成できる
- ただし、どのようなストイキオメトリーをモデリングするかは、知見が必要

Au on rutile $\text{TiO}_2(1\ 1\ 0)$

TABLE III. Adsorption energy E_{ad} of Au on the $\text{TiO}_2(110)$ surfaces defined from a Au monolayer. Unit is eV/adatom.

	Site A	Site B	Site C	Site D	Site E	Site F
Stoichiometric	-0.014	0.103	0.043	0.101	0.024	
Ti-rich	1.501	0.522	0.548	1.900	1.507	1.904
O-rich	4.246	0.312	0.820	3.611	4.239	2.547

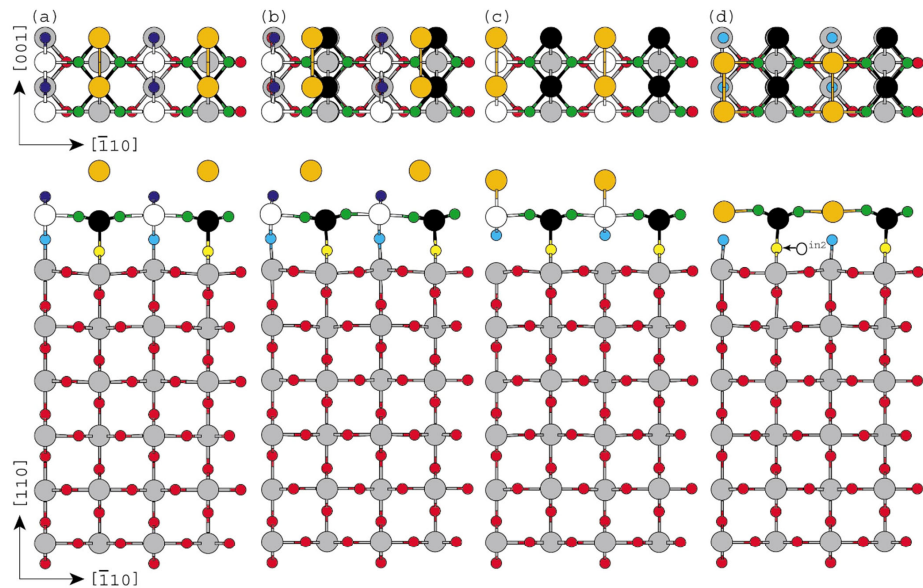


FIG. 2. (Color) Stable structures; (a) Au adsorption on the site B and (b) on the site D for the stoichiometric surface, (c) on the site F for the Ti-rich surface, and (d) on the site A for the O-rich surface. The orange and yellow circles represent the Au and O^{in2} atoms, respectively. The other colored circles indicate the same atoms as those in Fig. 1.

PHYSICAL REVIEW B **69**, 235404 (2004)

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

41

Au on rutile $\text{TiO}_2(1\ 1\ 0)$

- 吸着構造の候補を生成して、エネルギーを比較することは、時間はかかるが、自動化できる
- どのような表面の化学量論比をモデル化するかは、ある程度の知見が必要
 - Stoichiometricは、理想的な劈開面のなので簡単
 - O-poorは、真空での表面科学の研究で報告済み
 - O-richは、このときは酸素雰囲気や水があるような状況ならあり得るのではと考えたうえで、モデル構造を作成
- この後、何を解析すべきかは、自動化は困難

PHYSICAL REVIEW B **69**, 235404 (2004)

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

- 30 -

42

Au on rutile $\text{TiO}_2(1\ 1\ 0)$

TABLE IV. Bond lengths between the Au adatom and the nearest Ti atom, $d_{\text{Au-Ti}}$, and between the Au adatom and the nearest O atom, $d_{\text{Au-O}}$. Units is angstroms. For the site A of the O-rich surface, two values of $d_{\text{Au-O}}$ are listed. One is the distance between the Au adatom and the in-plane O atom. Another in the parentheses is the distance between the Au adatom and the inner O atom.

	B of stoichiometric	D of stoichiometric	F of Ti-rich	A of O-rich
$d_{\text{Au-Ti}}$	3.03 (2.66, ^a 2.80 ^b)	3.10 (2.85 ^b)	2.68	3.64
$d_{\text{Au-O}}$	3.35 (3.11 ^a)	2.78 (2.29 ^b)	3.26	2.07 (2.28)

- 簡単なところで、結合距離
- stoichiometricとO-poorは実験値と比較

PHYSICAL REVIEW B **69**, 235404 (2004)

Au on rutile $\text{TiO}_2(1\ 1\ 0)$

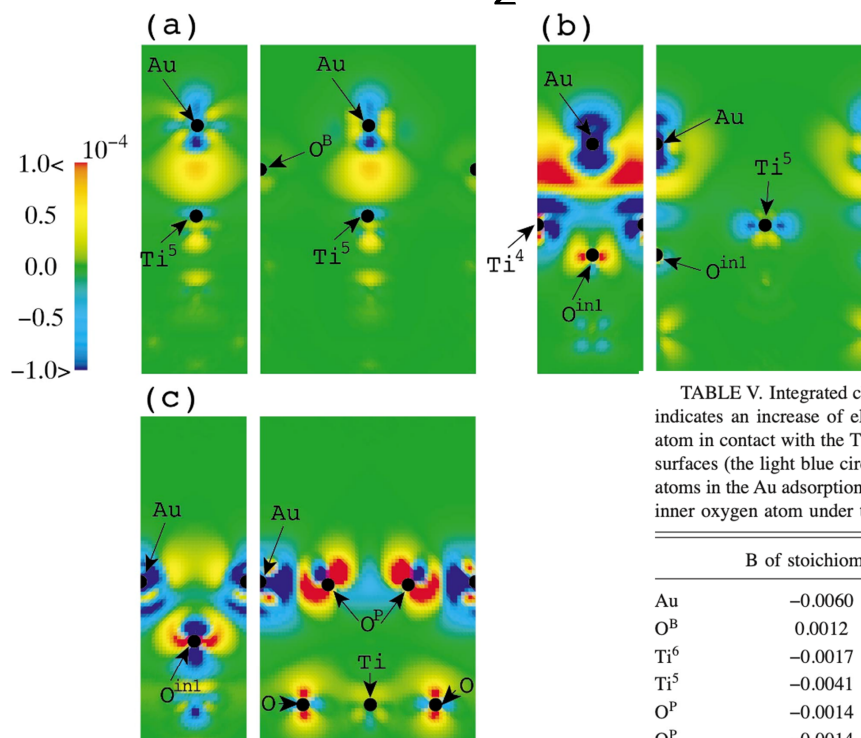


TABLE V. Integrated charge-density difference. A positive value indicates an increase of electrons. O^{in1} indicates the inner oxygen atom in contact with the Ti^6 atoms in the stoichiometric and Ti-rich surfaces (the light blue circles in Fig. 2) and in contact with the Au atoms in the Au adsorption on the O-rich surfaces. O^{in2} indicates the inner oxygen atom under the Ti^5 (the yellow circles in Fig. 2).

	B of stoichiometric	F of Ti-rich	A of O-rich
Au	-0.0060	0.0521	-0.2836
O^{B}	0.0012		
Ti^6	-0.0017	-0.1123	
Ti^5	-0.0041	-0.0267	-0.0200
O^{P}	-0.0014	-0.0047	0.0501
O^{P}	-0.0014	-0.0047	0.0501
O^{in1}	-0.0001	0.0126	0.0583
O^{in2}	0.0010	0.0004	0.0005

PHYSICAL REVIEW B **69**, 235404 (2004)

Au on rutile $\text{TiO}_2(110)$

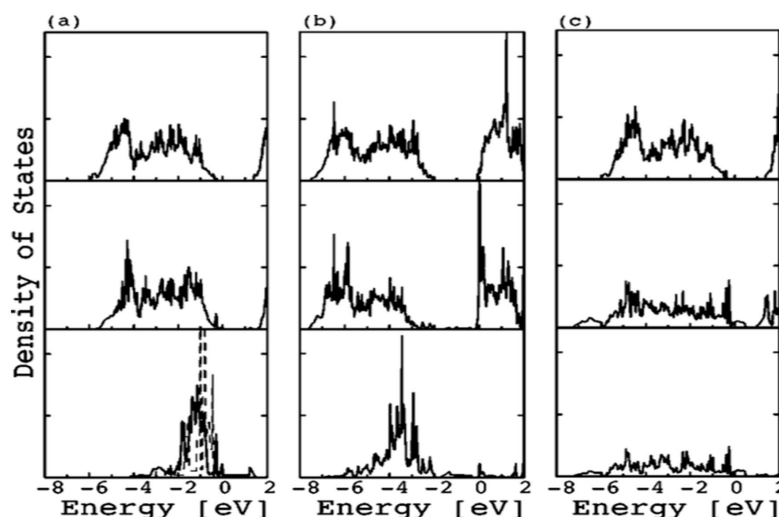


FIG. 4. The local density of states for the Au/ $\text{TiO}_2(110)$ system; (top) the bulk region, which is the center of slab; (center) the top layer of $\text{TiO}_2(110)$ substrate; (bottom) the Au adlayer. The LDOS for the systems where the Au atoms are adsorbed on the B site of the stoichiometric surface, on the F site of the Ti-rich surface, and on the A site of the O-rich surface are shown in (a), (b), and (c), respectively. Dashed line in the bottom panel of (a) indicates the DOS of the free Au monolayer. The Fermi level is chosen as zero of energy.

PHYSICAL REVIEW B **69**, 235404 (2004)

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

45

Au on rutile $\text{TiO}_2(110)$

- 電荷移動と軌道混成を調べた（ある意味で王道）
 - O-rich表面では、Auが電子を多く失っていることがわかった
 - 価電子を考えると、d電子に影響がある
 - Au 5d軌道とO 2p軌道の強い混成が見られる
- 元々は、金が酸化物上に担持するとマイルドな触媒活性が現れる実験結果から第一原理計算による研究がスタート
- かなり昔の研究なので、現在なら他に調べられる物性値があるかもしれない
 - 新たな解析手法の開発や計算機能力の発展など
 - 専門家の知見があると、深掘りできる

PHYSICAL REVIEW B **69**, 235404 (2004)

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

第一原理計算コンサルティング サービスのご紹介

第一事業部 原田 昌紀

AI では見抜けない本質！
第一原理計算×専門家サポートで材料開発の課題解決
2025年8月5日（火）
アドバンスソフト株式会社

材料開発における 第一原理計算のコンサルティングサービス

サービスの目的

材料の新規開発や高性能化において、量子力学の基本原則に基づき高精度な物性予測が可能な「第一原理計算」は核となる手法であり、本手法の技術力を高めることは**御社の技術競争力を高める**上で重要です。

AI技術による自動化のトレンドはありますが、最適な計算条件設定、計算結果の考察、開発へのフィードバックという面ではまだまだ十分とはいえません。

今回、アドバンスソフトでは、第一原理計算のコンサルティングサービスをご提案いたします。計算手法に精通した専門技術者が、第一原理計算ソフトウェアAdvance/PHASEのご使用を通して、**お客様の材料開発における様々な課題解決をサポート**いたします。

サービスの概要

サービスの内容	➤ 契約期間中の、第一原理計算ソフトウェアAdvance/PHASEのライセンス数無制限での使用権利。 ➤ Advance/PHASEの機能の使用サポート。 ➤ Advance/PHASEの使用に関するコンサルティング（使用方法のご提案、使用サポート、結果の考察など）。 ➤ 第一原理計算全般に関するコンサルティング（調査、解説、講習など）。 ➤ ご希望があれば、弊社受託サービス（解析、開発）のご提案。
コンサルティング方法	➤ コンサルティングの内容に応じてポイントが消化されます。ポイントが無くなるまでコンサルティングを依頼することが可能です。 ➤ コンサルティング依頼はメールにてお問い合わせいただきます。
契約期間	➤ 1年間を基本としています。
特徴	➤ ご依頼いただく内容はAdvance/PHASEの開発者とも共有しているため、より踏み込んだコンサルティングが可能です。

コンサルティング内容の例

- お客様の材料開発における課題に対して、どのようなアプローチで解析をした方がいいかのご提案。
- モデルの作成や計算条件に関するアドバイス。
- お客様の解析結果や解析報告のレビュー。
- お客様若手技術者への第一原理計算の講習。
- 論文等で発表された新しい第一原理計算手法に関する解説。
- 受託開発、受託解析のご提案。

（※あくまでも一例であり、ご依頼内容はお客様にてご自由にお決めいただけます。対応可能かどうかはその都度ご回答いたします。）

ご依頼方法とコンサルティングのフロー

- ① お客様より指定アドレスにメールにてご依頼内容をお送りください。
- ② 弊社より使用されるポイントと完了までの期間の目安をお伝えします。
- ③ お客様にて最終的に依頼するかを判断し返信いただきます。
- ④ ご依頼いただいた内容に基づいて弊社からコンサルティングさせていただきます。

ご契約の種類

お客様がご希望されるコンサルティングの頻度やボリュームに応じた以下の3種類のメニューをご用意しています。

契約種別	開始時のポイント	月毎の使用ポイント上限※2	期間
Standard	80	10	1年間
Gold	120	15	1年間
Short※1	40	10	6カ月間

※1：期間限定(2026年3月まで)でのご提供を予定しています。

※2：厳密な制限ではありませんが、この上限を超えると完了までに時間を要する場合があります。

使用ポイントの目安

ポイント	ご依頼内容例
0	➤ 機能の使用方法に関するお問い合わせ ➤ 受託開発、受託解析のご提案。
1～	➤ モデルの作成や計算条件に関するアドバイス
2～	➤ お客様の解析結果や解析報告書のレビュー
3～	➤ 最適な計算条件設定
4～	➤ お客様の材料開発における課題に対して、どのようなアプローチで解析をした方がいいかのご提案。
5～	➤ お客様若手技術者への第一原理計算の講習（例：4時間×2日）。
6～	➤ 論文等で発表された新しい第一原理計算手法に関する解説。

サービスの価格について

契約種別	開始時のポイント	月毎の使用ポイント上限※2	期間	価格
Standard	80	10	1年間	1000万円
Gold	120	15	1年間	1500万円
Short※1	40	10	6カ月間	500万円

※1：期間限定(2026年3月まで)でのご提供を予定しています。

※2：厳密な制限ではありませんが、この上限を超えると完了までに時間を要する場合があります。



第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE 最新動向: 高速化、自動化と機械学習

技術第1部 胡 春平

AI では見抜けない本質！
第一原理計算×専門家サポートで材料開発の課題解決
2025年8月5日（火）
アドバンスソフト株式会社

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

1



本日の内容

本日は、第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE の最新動向について、特に3つのキーワードに焦点を当ててご紹介します。

高速化：

機械学習NEB法による反応経路探索の高速化
電子状態計算の高速化：Davidson法の改良

自動化：

Python(ASE)連携による柔軟な計算制御
体積弾性率などの物性値の完全自動計算
ワークフロー機能の増強

機械学習：

機械学習力場の作成と活用: M3GNet/MatGL, OCP(fairchem) など

新機能： X線発光スペクトル (XES) の計算
Materials Informatics機能の改良
GUI改良

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

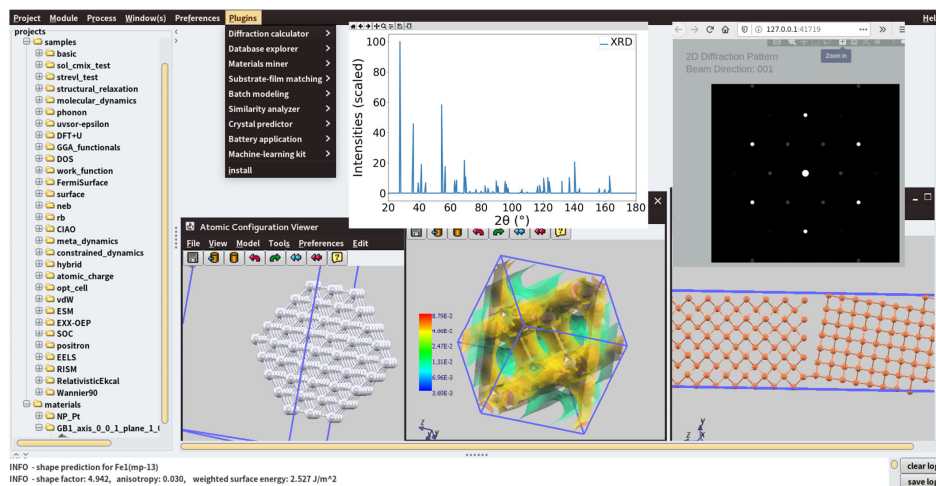
Advance/PHASEとは

密度汎関数理論（DFT）に基づいた、日本製の第一原理計算ソフトウェアです。

- 1993年から開発が始まり、30年以上の歴史と実績を持ちます。
- 豊富な計算機能、使いやすいGUI、迅速なサポート体制が特徴です。
- 原子構造から、全エネルギー、力、電子状態、磁気特性、光学特性、反応経路など、多岐にわたる物性計算が可能です。

新材料の探索を加速する

- 触媒設計：化学反応の経路・反応障壁を計算
- 高強度材料：弾性率を計算
- 電子デバイス：仕事関数や誘電率を計算



専用GUI (2004年から発売)

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

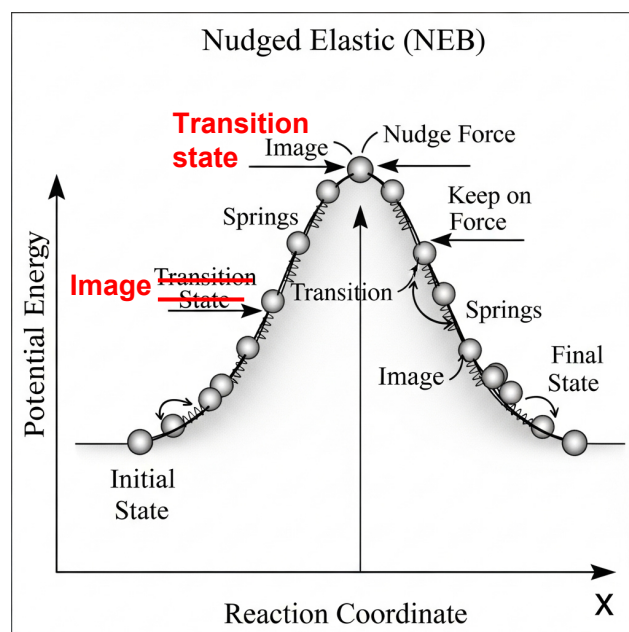
3

反応経路探索の高速化 (1) - NEB法とは

化学反応や材料中の原子拡散を理解するには、反応がどのような経路をたどり、どれくらいのエネルギー障壁（活性化エネルギー）を越える必要があるかを知ることが不可欠です。Nudged Elastic Band (NEB)法は、この反応経路とエネルギー障壁を特定するための標準的な手法です。

- 反応の始状態(IS)と終状態(FS)の間に、いくつかの中間状態（イメージ）を配置します。
- 隣り合うイメージをバネでつなぎ、各イメージに働く力を計算して構造を最適化することで、エネルギーが最も低い経路（最小エネルギー経路：MEP）を求めます。
- MEP上で最もエネルギーが高い点が、反応のボトルネックとなる遷移状態(TS)です。

課題：従来法では、すべての中間イメージでコストの高い第一原理計算を何度も繰り返す必要があり、計算時間が膨大になるという問題がありました。



AIによる生成したNEB法の概念図

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.



反応経路探索の高速化 (2)

- 機械学習NEB (ML-NEB)

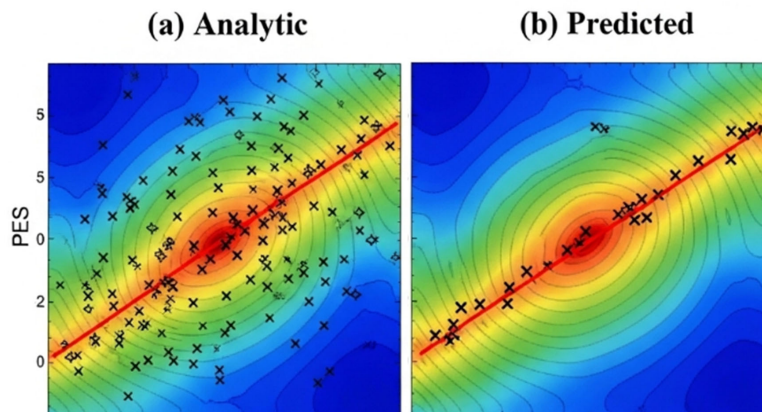
Advance/PHASEでは、このNEB計算のボトルネックを解消するため、機械学習を導入した ML-NEB法 をサポートします。

<https://github.com/SUNCAT-Center/CatLearn>

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.156001>

ML-NEBの仕組みと利点

- 代理モデルの構築：少数の第一原理計算結果から、ガウス過程回帰(GPR)を用いてポテンシャルエネルギー曲面の代理モデルを構築します。
- 能動的学習：代理モデルの予測値と「不確実性」を評価し、次に計算すべき最も重要なイメージを賢く選択します。
- 圧倒的な高速化：第一原理計算の回数が劇的に減少し、従来法に比べて1桁以上高速な計算が可能です。
- 優れたスケーラビリティ：計算コストが中間イメージの数に依存なくなります。



AIによる生成したML-NEB法の概念図
(PES: Potential Energy Surface)

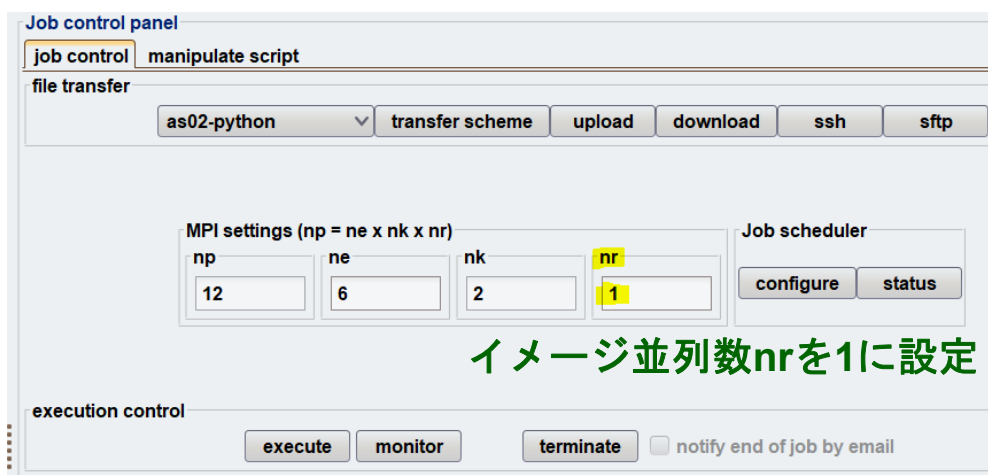
遷移状態を第一原理計算で確認してから決めますので、**真の遷移状態**であることを保証します。



ML-NEB計算の実行手順

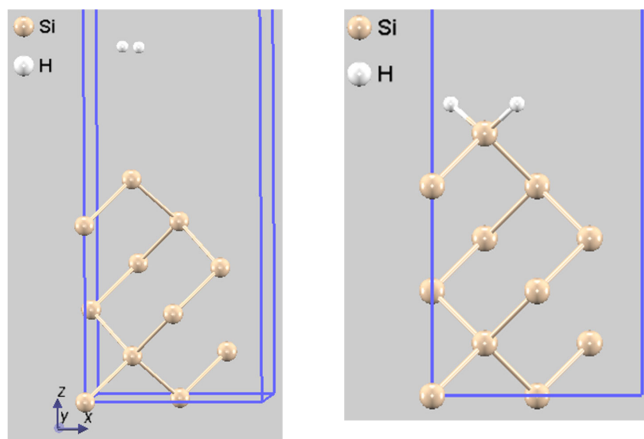
python環境を利用（後で詳しく説明します）

- (1) NEB計算プロジェクトにおいて、ホストas01-**python**を選択
- (2) **イメージ並列を設定なし**してジョブを投入



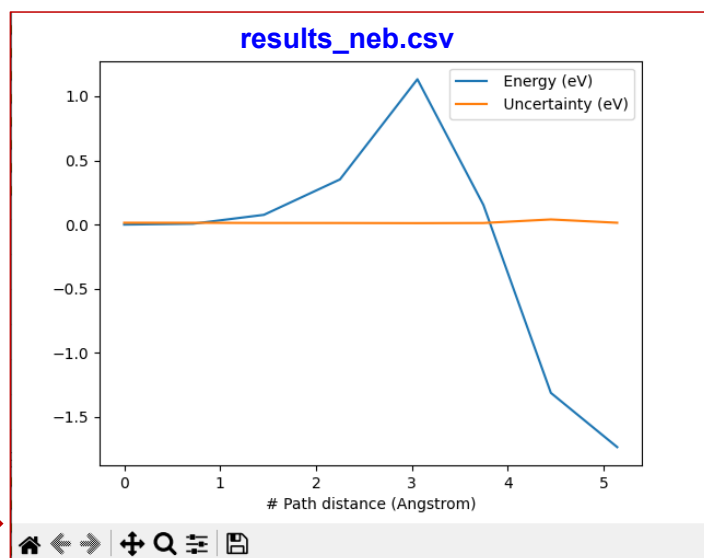
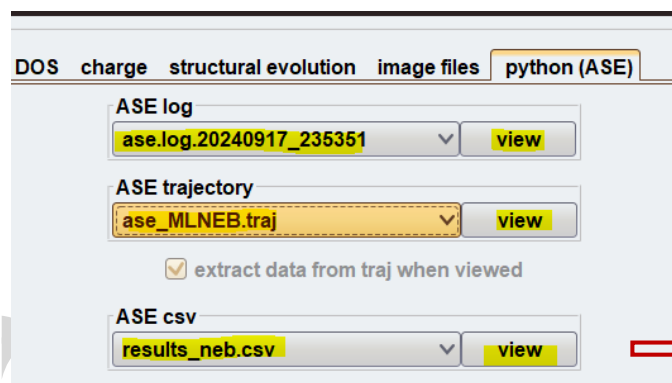
イメージ並列数nrを1に設定

ML-NEB法を用いた計算例 (1)



始状態:
Si表面 + H₂分子

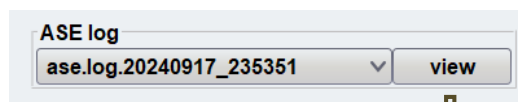
終状態:
Si表面に水素が解離状態で吸着



Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

7

Si001_H2



Method	Step	Time	Pred. barrier (-->)	Pred. barrier (<--)	Max. uncert.	Avg. uncert.	fmax
ML-NEB	0	2024-09-17 23:56:29	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
ML-NEB	1	2024-09-17 23:56:29	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	3.907767
ML-NEB	2	2024-09-17 23:56:29	2.225730	3.959930	2.012720	0.916600	2.520645
ML-NEB	3	2024-09-17 23:56:29	2.556570	4.290780	0.256580	0.123560	3.516345
ML-NEB	4	2024-09-17 23:56:29	2.492160	4.226370	0.185600	0.131020	2.653228
ML-NEB	5	2024-09-17 23:56:29	2.945180	4.679380	0.880230	0.374210	1.567507
ML-NEB	6	2024-09-17 23:56:29	2.887290	4.621490	0.538410	0.148690	3.791157
ML-NEB	7	2024-09-17 23:56:29	2.885370	4.619580	0.210510	0.046850	1.947258
ML-NEB	8	2024-09-17 23:56:29	2.716470	4.450670	0.160230	0.066800	3.868147
ML-NEB	9	2024-09-17 23:56:29	2.619970	4.354170	0.176390	0.049310	1.536871
ML-NEB	10	2024-09-17 23:56:29	2.666890	4.401090	0.159560	0.041760	1.917283
ML-NEB	11	2024-09-17 23:56:29	2.438640	4.172840	0.128510	0.048220	3.694050
ML-NEB	12	2024-09-17 23:56:29	2.249640	3.983840	0.109850	0.051120	2.447805
ML-NEB	13	2024-09-17 23:56:29	2.129780	3.863980	0.187970	0.053260	2.152487
ML-NEB	14	2024-09-17 23:56:29	1.430600	3.164810	0.102010	0.056810	2.170844
ML-NEB	15	2024-09-17 23:56:29	1.187330	2.921530	0.172450	0.083310	2.152293
ML-NEB	16	2024-09-17 23:56:29	1.183450	2.917650	0.156020	0.066660	0.472810
ML-NEB	17	2024-09-17 23:56:29	1.126590	2.860790	0.102460	0.049500	6.653009
ML-NEB	18	2024-09-17 23:56:29	1.155580	2.889780	0.142260	0.064900	0.982412
ML-NEB	19	2024-09-17 23:56:29	1.130550	2.864760	0.127910	0.044040	3.236426
ML-NEB	20	2024-09-17 23:56:29	1.131460	2.865660	0.052340	0.024160	2.034019
ML-NEB	21	2024-09-17 23:56:29	1.131660	2.865870	0.043970	0.018460	0.155270
ML-NEB	22	2024-09-17 23:56:29	1.132730	2.866930	0.041460	0.017400	0.038264

Congratulations! Stationary point is found! Check the file 'evaluated_structures.traj' using ASE.

Training a Gaussian process...

Number of training points: 24

Gaussian process trained.

Congratulations! Your ML NEB is converged. If you want to plot the ML NEB predicted path you should check the files 'results_neb.csv' and 'results_neb_interpolation.csv'.

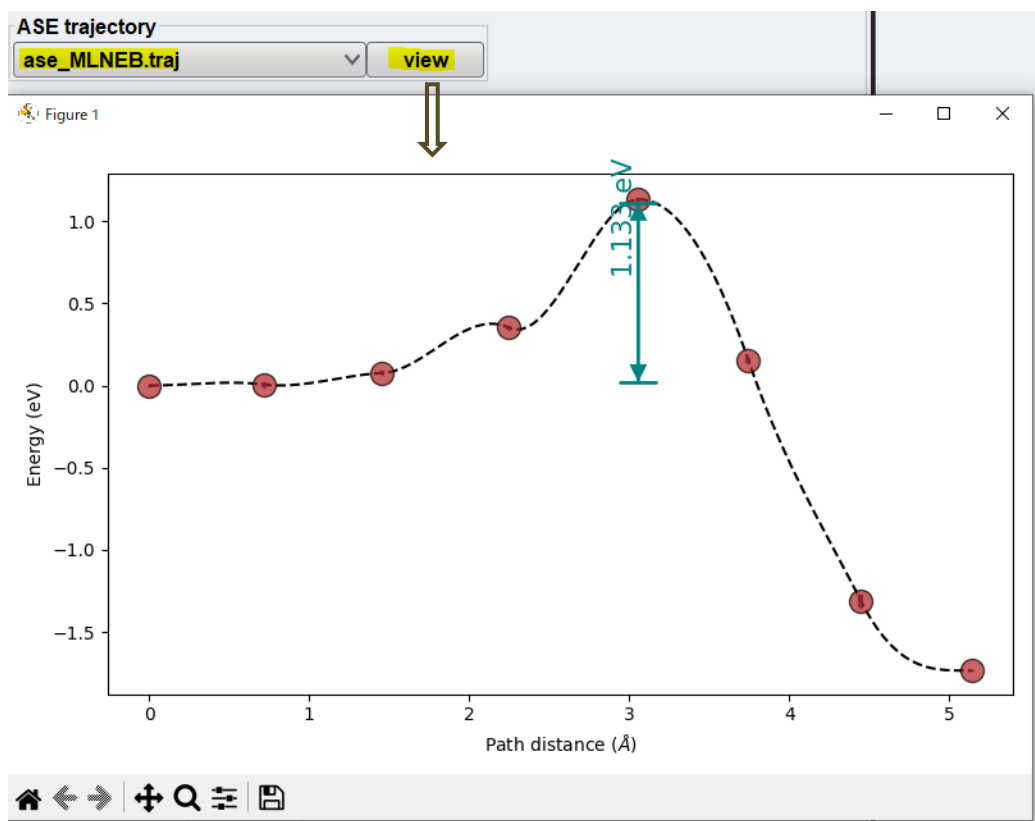
The optimized predicted path can be found in: ase_MLNEB.traj

Number of steps performed in total: 22

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

Si001_H2

- ・ 既存の計算結果と一致します。
- ・ 遷移状態は特定されています。

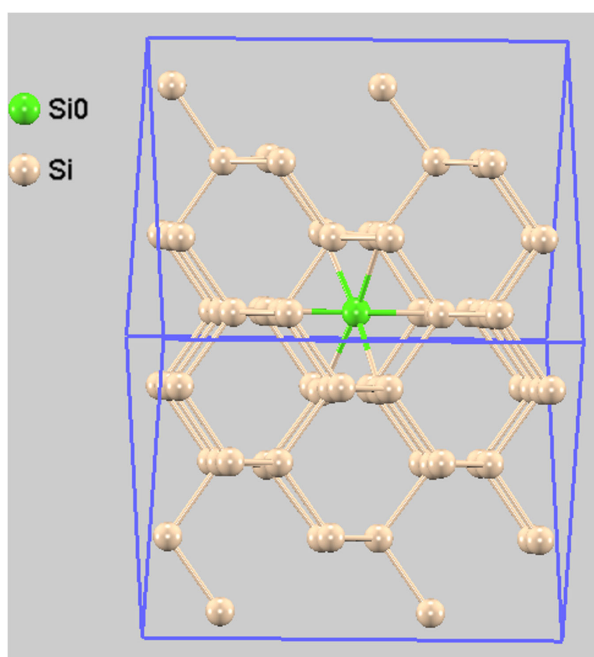


Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

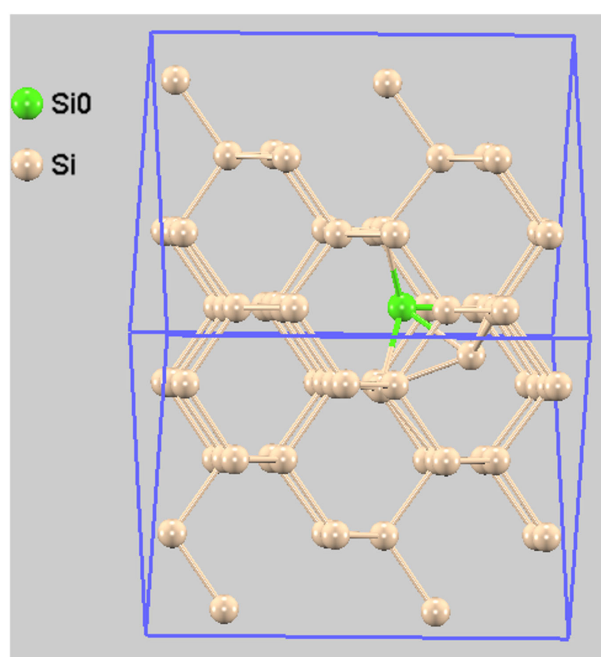
9

ML-NEB法を用いた計算例 (2)

Si結晶中における自己格子間原子の拡散過程



始状態



終状態

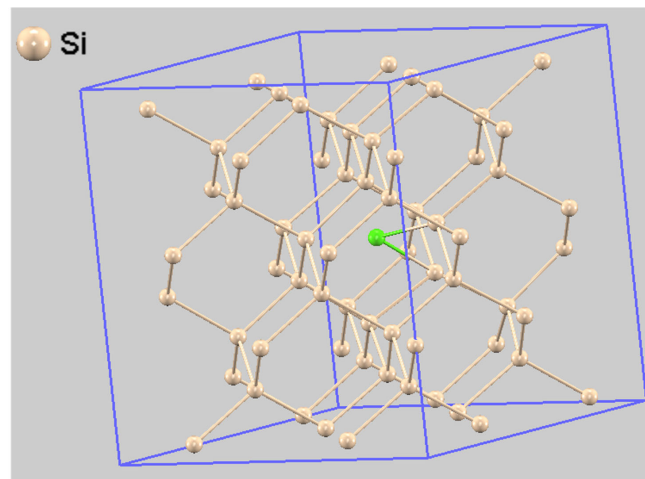
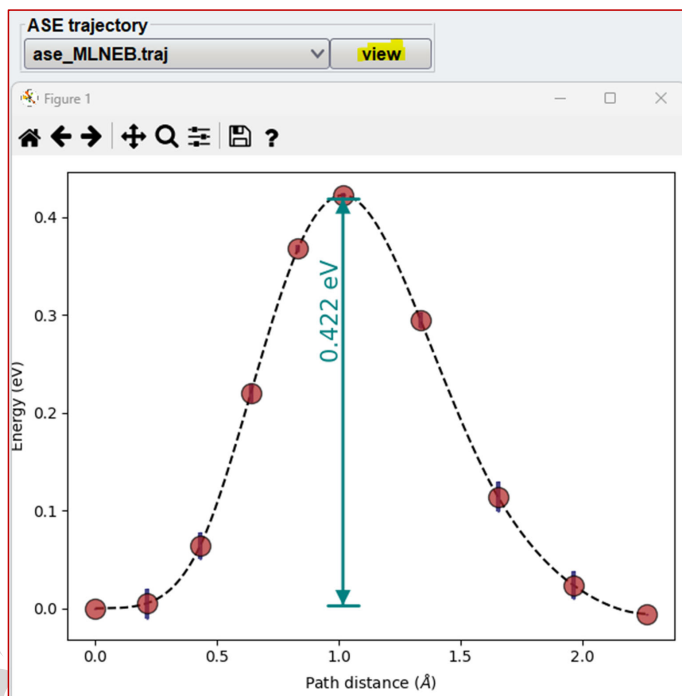
Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

Si結晶中における自己格子間原子の拡散過程

拡散障壁 (0.42 eV): 既存手法と同等の結果でした。

計算コスト: **FIRE法の約 1/24**

※ 機械学習NEB計算では、1/8のコア数（イメージ並列なし）で、しかも1/3の時間で収束できました。



遷移状態（エネルギー障壁の頂点）での原子配置

電子状態計算の高速化 - Davidson法の改良

第一原理計算は、巨大なハミルトニアン行列 $\mathbf{H}$ の固有値問題を解くことに帰着します。

$$\mathbf{H} \psi_i = E_i \psi_i$$

- $\mathbf{H}$: ハミルトニアン行列（数万～数百万次元）
- ψ_i : 電子軌道（固有ベクトル）
- E_i : 軌道エネルギー（固有値）

高速化の鍵：補正ベクトルの効率的な計算

1. 残差の計算：現在の近似解 (ψ_k, E_k) の「ズレ」を計算します。
残差ベクトル: $r_k = (\mathbf{H} - E_k \mathbf{I}) \psi_k$
2. 補正ベクトルの計算：この「ズレ」を打ち消す補正ベクトル w_k を求めます。

課題： 行列 $\mathbf{H}$ が巨大すぎて、すべての解を一度に求める「直接対角化」は計算コスト的に不可能です。

目的： エネルギーが低い、物理的に重要な少数の固有値と固有ベクトルだけを効率的に見つけたい。



電子状態計算の高速化 - Davidson法の改良

Davidson法とは

Davidson法は「部分空間法」と呼ばれる手法の一種です。小さな「部分空間」の中で小さな固有値問題を解き、その解の精度を反復的に向上させていくことで、巨大な行列H全体を扱うことなく、目的の解に収束させます。

Advance/PHASEでの改良

実装中 (9月中旬にリリース予定)

・修正Davidson法：

① 前処理行列の改善: 補正ベクトルを計算する際の近似行列を、単純な対角行列Dだけでなく、よりハミルトニアンHの特性を捉えつつも逆行列の計算が容易な前処理行列に置き換えます。

② 残差ベクトルの更新: 残差ベクトルの更新方法や、部分空間を拡大するベクトルの選び方を工夫し、計算の安定性を高めます

・Davidson Deflation法：

一度見つけた解の影響を取り除きながら（デフレーション）、次の解を探索。不要な再収束を防ぎ、多バンド計算を高速化。



Pythonを用いたAdvance/PHASEの遠隔実行と解析フロー

この機能により、リモートサーバーでのPythonを用いた計算実行から結果の取得、解析までがGUI上でシームレスに行えるようになります。



Python(ASE)連携による柔軟な計算制御

Advance/PHASEは、原子シミュレーションのためのPythonライブラリであるASE (Atomic Simulation Environment) とシームレスに連携します。

この連携機能は、増強され続けています。

弾性率計算の例

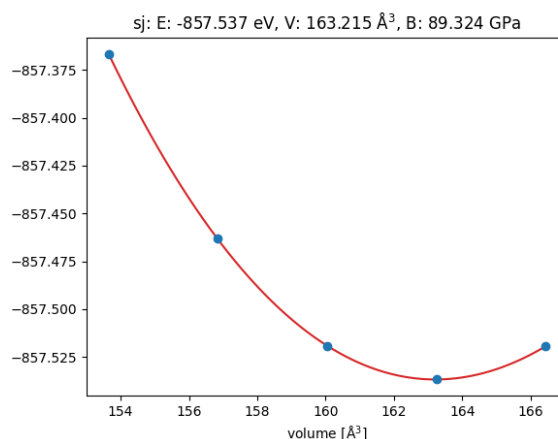
GUIとスクリプトの融合

- GUIによる直感的な操作と、Pythonスクリプトによる柔軟でパワフルな計算制御を両立できます。

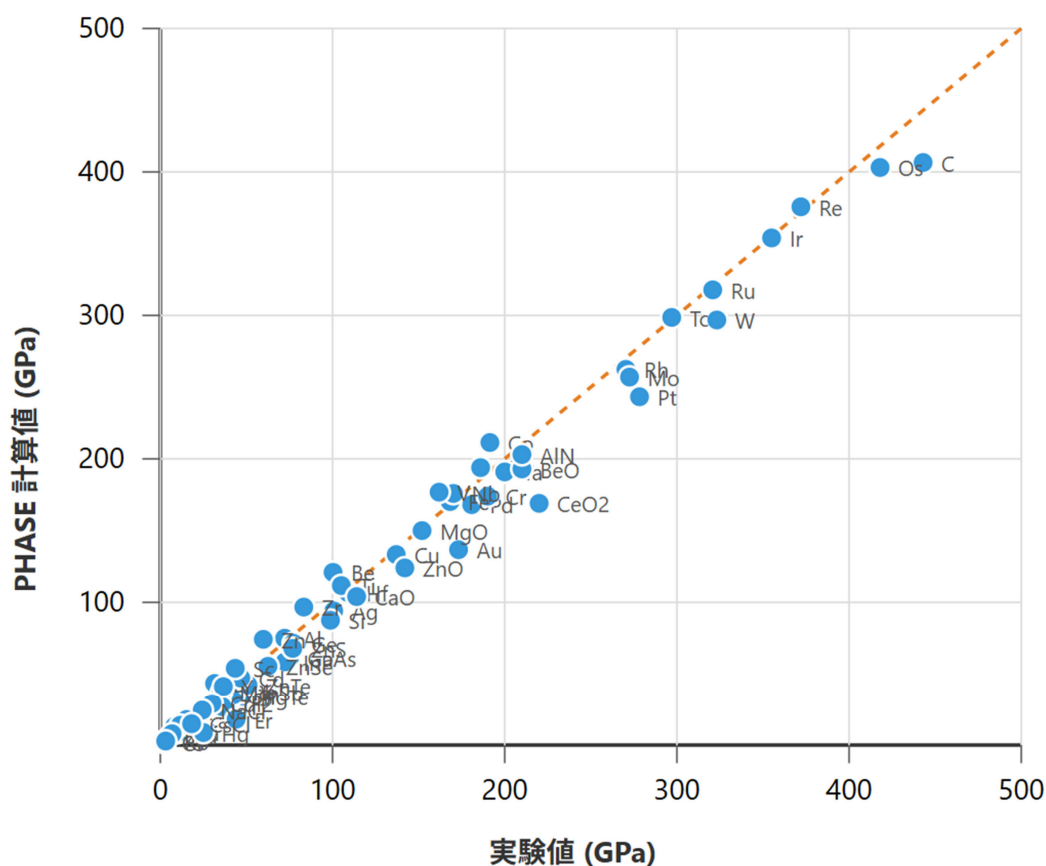
- 複雑なシミュレーションタスクや、定型的なデータ処理を自動化し、研究開発の効率を飛躍的に向上させます。

- Pythonの豊富な科学技術計算ライブラリと組み合わせることで、高度な解析も容易になります。

```
phase.set(mobile=True)
calc_eos = calculate_eos(atoms, trajectory=prefix+'.traj')
V, E, B = calc_eos.fit()
kv = B / kJ * 1.0e24
print('Bulk modulus Kv (GPa): ', kv)
calc_eos.plot(prefix+'.png')
```



体積弾性率の計算値と実験値の比較



弾性率の一括自動計算の実現

```
C_11 308.21217605260944
C_33 300.1886068744161
C_12 112.96381168167036
C_13 131.86307988009833
C_44 172.4993576388972
C_14 0.9226860063399221
```

計算結果 in ase.log

※ 結晶の対称性によって弾性常数の出力が変わります。

The full 6x6 elastic tensor matrix

```
308.21217605260944 112.96381168167036 131.86307988009833 0.9226860063399221 0.0 0.0
112.96381168167036 308.21217605260944 131.86307988009833 -0.9226860063399221 0.0 0.0
131.86307988009833 131.86307988009833 300.1886068744161 0.0 0.0 0.0
0.9226860063399221 -0.9226860063399221 0.0 172.4993576388972 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 172.4993576388972 0.9226860063399221
0.0 0.0 0.0 0.0 0.9226860063399221 172.4993576388972
```

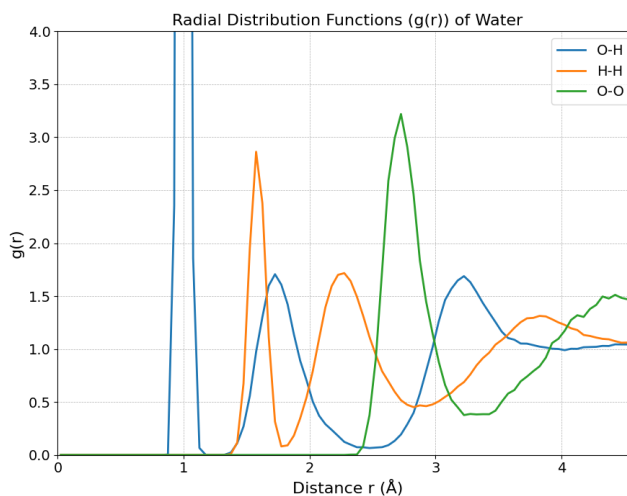
	bulk (GPa)	Young (GPa)	shear (GPa)	Poisson
Voigt	185.554767	334.628821	139.494480	0.199434
Reuss	185.501570	307.583301	125.683002	0.223647
Hill	185.528168	321.240730	132.588741	0.211418

体積弾性率、ヤング率、せん断弾性率、ポアソン比を一つのジョブで算出可能

自動化：スクリプトを用いたデータ処理

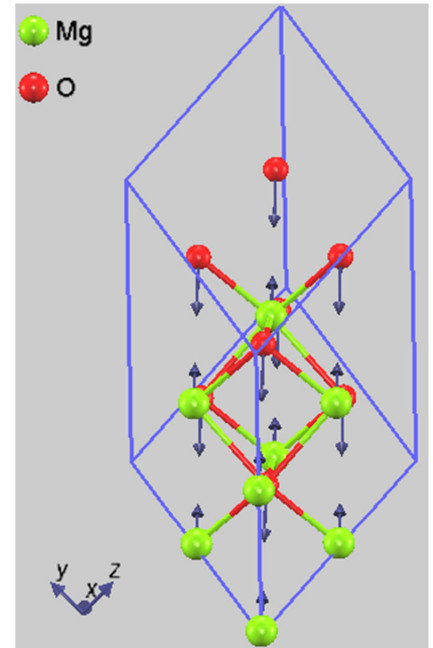
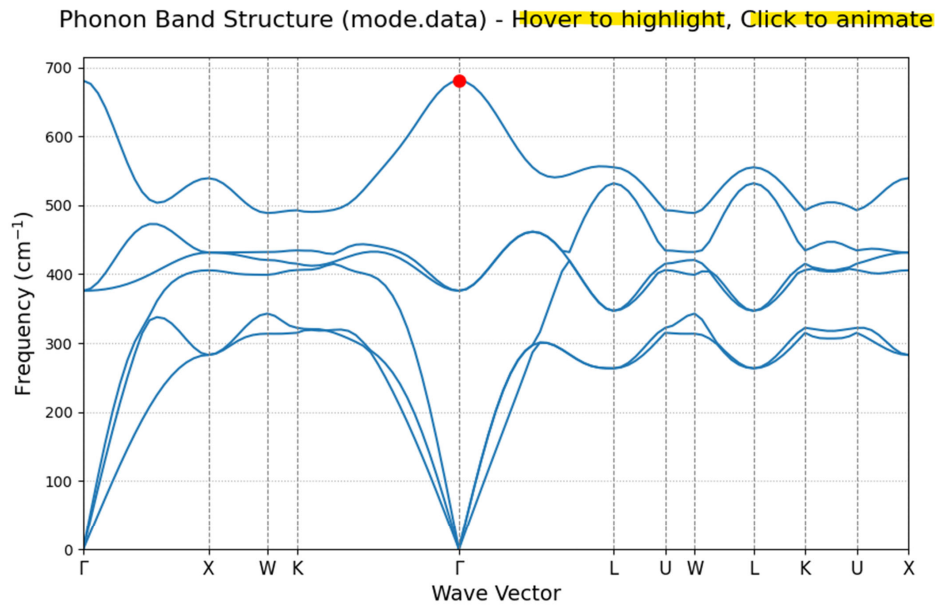
計算結果に対してGUIだけではなく、スクリプトでも簡単に処理できるようになります。

- 電子バンド図、状態密度図
- フォノンバンド図、フォノン状態密度図
- E-V曲面、フィッティング
- 原子運動軌跡
- RDF (動径分布関数)、PRDF (部分動径分布関数)、配位数
- NEB energy profile
- MSDと拡散係数



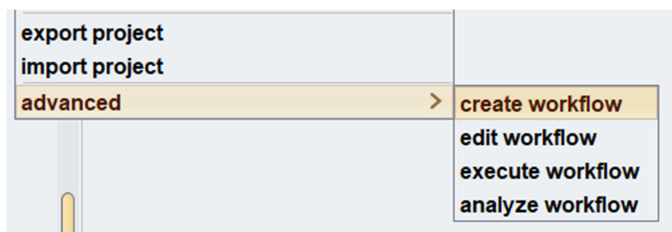
第一原理MDシミュレーションによる統計平均したPRDF

GUIとスクリプトの連動例： 任意フォノンモードの可視化



イオン性結晶MgOのフォノンバンド (LO-TO分裂効果あり)

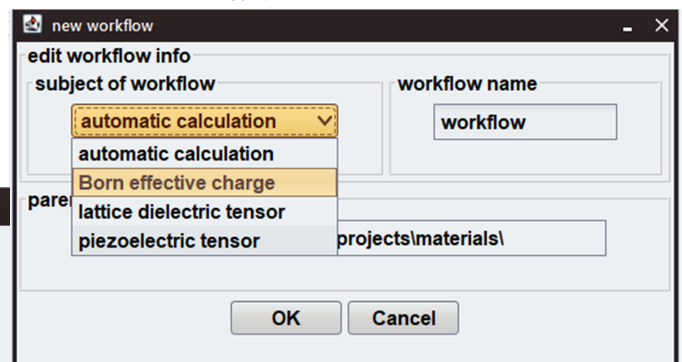
自動化：ワークフロー機能



Final energies (basic) **ワークフロー解析**

project	energy	forcmx	jobstatus
H-Si001\SCF	-236.9313449659	0.0000000000	FINISHED
TiO2\anatase	-181.1864387984	0.0000000000	FINISHED
TiO2\rutile	-181.1795753317	0.0000000000	FINISHED
GaN\SCF	-172.9926165638	0.0000000000	FINISHED
ZnO\SCF	-157.9954824413	0.0000000000	
Cr\SCF	-121.8769166553	0.0000000000	FINISHED
GaAs\SCF	-84.013921392	0.0000000000	FINISHED

ワークフロー作成



改良しました

Edit workflow: multi blockの編集

PHASE ver.4.4では、edit workflowを用いて一つのinput blockが編集可能ですが、複数のinput block (control, structure, ...)が同時に一括編集できません。

最新開発版では、複数のinput blockも編集可能になりました。

機械学習機能 (1)

- 機械学習NEB法のサポートのほか、Advance/PHASEには様々な機械学習の関連機能が開発されています。

学習済のモデルによる物性値の予測 (GUI対応)

The given structure: mp-3688

Predicted properties for Er₄ Sn₄ O₁₄ in mp-3688

formation energy: -3.047 eV/atom
PBE band gap: 2.685 eV
bulk modulus K: 178.6 GPa
shear modulus G: 92.0 GPa

Existing results in Materials Project for mp-3688

formation energy: -3.031 eV/atom
PBE band gap: 2.683 eV
bulk modulus K: N/A
shear modulus G: N/A

物性値予測モデルのトレーニング (GUI対応)

データマイニング: 訓練用のデータをMaterials Projectなどから取得
モデルのトレーニング: MEGNet, MatGLをベースとしています。

Ref.: <https://matgl.ai/>

機械学習機能 (2)

- 第一原理計算の精度と古典計算の速度を両立するように構築された「機械学習力場 (MLP)」の利用が急速に広がっています。
Advance/PHASEは、MLPの構築と活用をサポートします。

機械学習力場の作成用のトレーニングデータの生成

Results viewer panel

general list of files log DOS charge structural evolution **NNP training data** image files

energy nfeqn.data (steps: 11182) **trajectory** nfdynm.data (frames: 11182)

steps (frames) used for training neural network potentials (NNP)

total	from	to	interval
11182	1	11182	10

file type of training data xsf (aenet) [click for hint](#)

generate training data

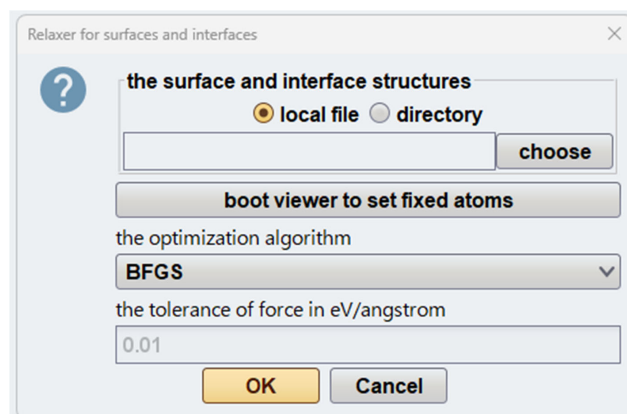
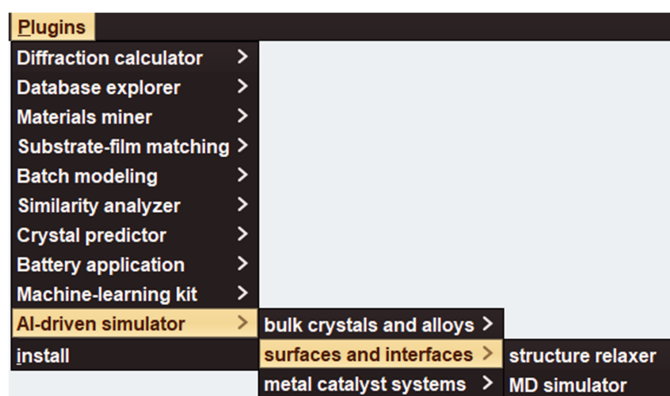
aenet, n2p2をサポートします。

機械学習機能 (3)

外部の学習済みモデルとの連携

改良しました

- M3GNet/matgl やOCP (fair-chem)といった、汎用性の高い学習済みMLPモデルをASE経由で利用し、構造最適化や分子動力学などを加速できます。

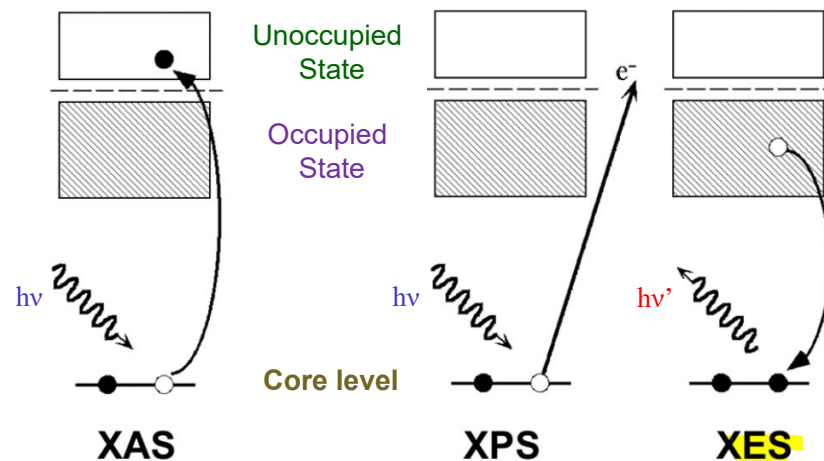


機械学習機能は、常に機械学習関連分野の最新鋭の成果を活用します。リリース版に同梱する機能だけではなく、ユーザー様のニーズに応じてカスタマイズ版のpythonパッケージの提供も可能です。

その他の新しい機能、改良した機能のご紹介

X線発光スペクトル(XES)計算機能の導入

概念図



Advance/PHASEは、ver.3からXAS, XPSの計算が可能。

XESの計算機能 → 最新開発版。

Ref.: Faisal M. Alamgir and Samson Y. Lai, *Chapter 3: Synchrotron X-ray Based Operando Studies of Atomic and Electronic Structure in Batteries*, Handbook of Solid State Batteries, pp. 79-108 (2015). URL: https://doi.org/10.1142/9789814651905_0003

XES計算の入力設定GUI

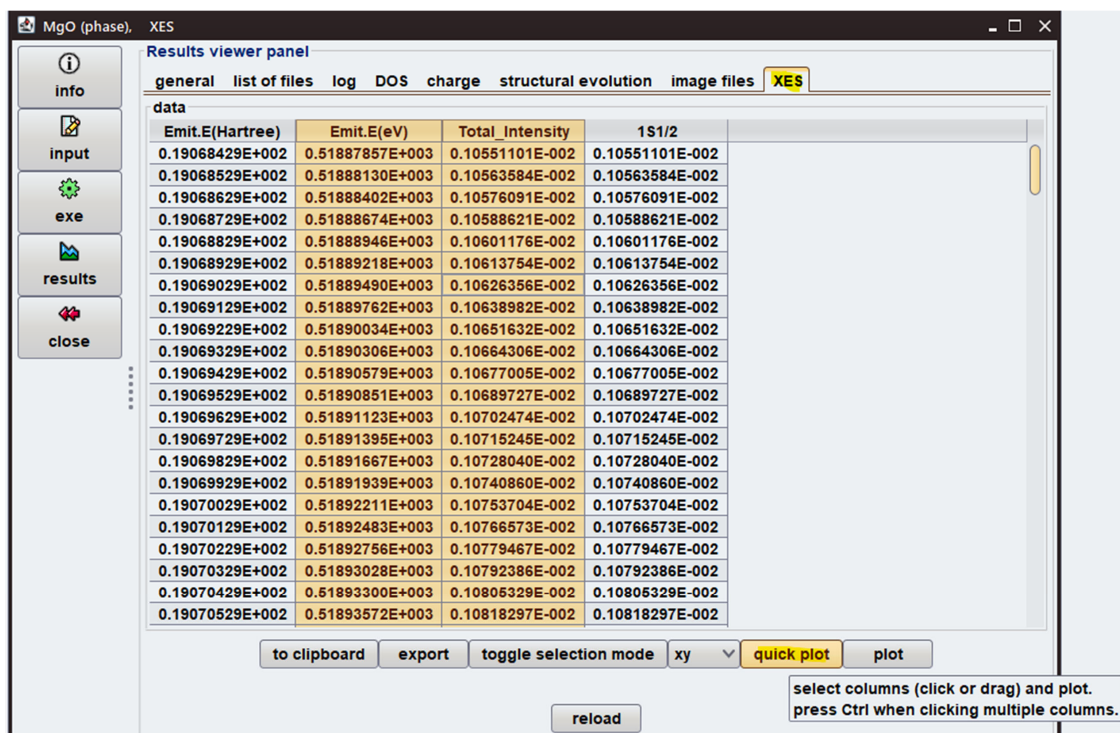
EELS/XAFS計算と似ていますが、いくつかの相違点があります。

The screenshot shows the 'Preparation panel' for XES calculations. Key sections include:

- general** | **basic settings** | **atomic configuration** | **post processing** | **structural evolution**
- DOS** | **charge** | **XES**
- XES spectrum**: on
- advanced settings**: ☐ polarization dependent
- Spectrum Parameters**:
 - Broadening: Lorentzian
 - Step Size: 1.0e-4 Hartree
 - Peak Width: 0.02 Hartree
- Core Transition Definition**:
 - Valence States for Transition: Relativistic Valence: on
 - Valence Band Window: 400 eV
 - Valence Band Upper Cutoff (optional): 10 eV
- Atom of Core Orbital**: 5
- Core Orbital Details**:
 - Core Energy Unit: eV
 - Table:

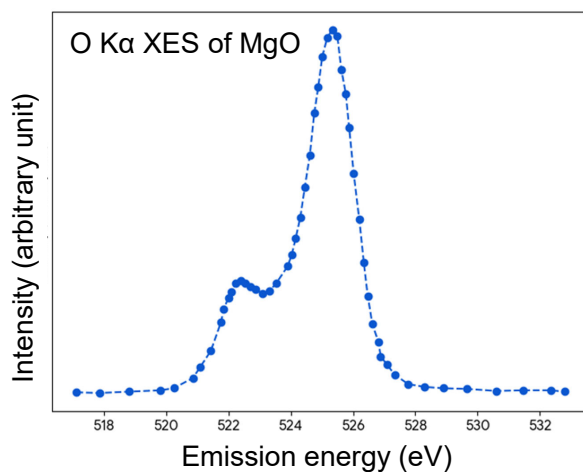
Core Orbital	Energy	Calculate
1s1/2	-525.800	on
- Select Core Wavefunction File (F_ORB)**: .inforb.data [Select]
- Core Hole Treatment**: ☐ Use Core Hole Pseudopotential (if available)
- Buttons: editor, save, undo, new input

XES計算の結果解析GUI



Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

27



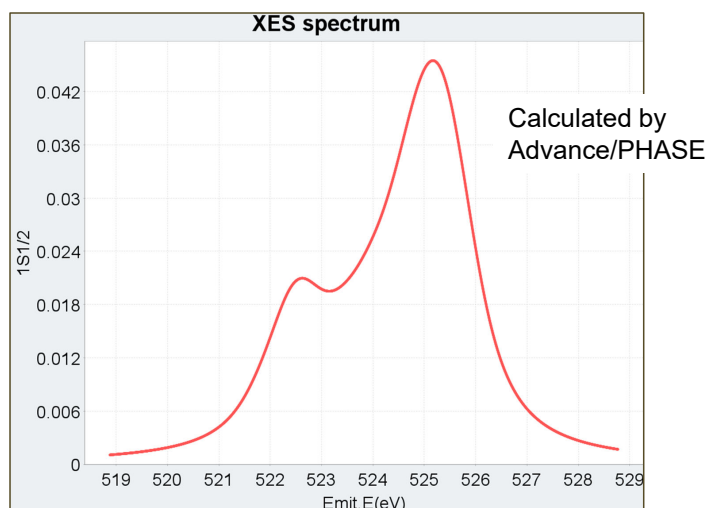
←実験結果 (plot with extracted data)

Interaction of Cu 3d and O 2p states in $Mg_{1-x}Cu_xO$ solid solutions with NaCl structure: X-ray photoelectron and x-ray emission study

V. R. Galakhov et al., Phys. Rev. B 62, 4922 (2000)

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.4922>

Advance/PHASEを用いたMgO の O Kα XESスペクトルの計算結果は、実験結果とよく一致します。



Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

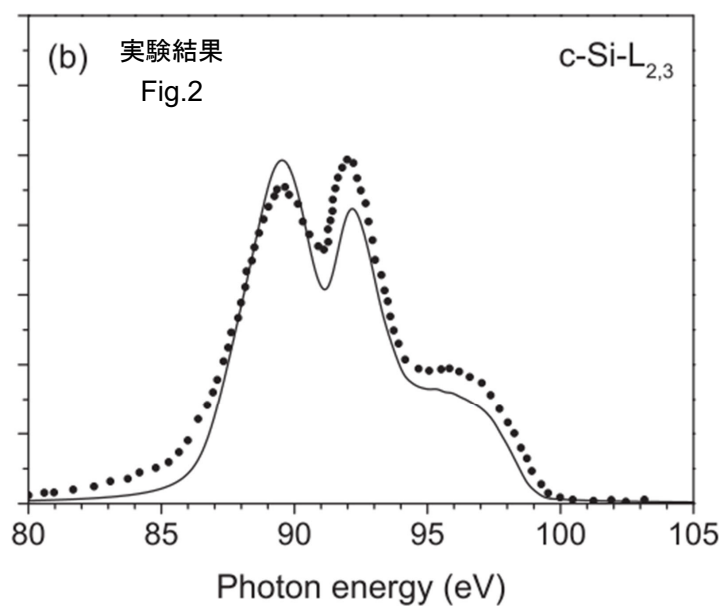
28

Silicon $L_{2,3}$ XESの計算結果

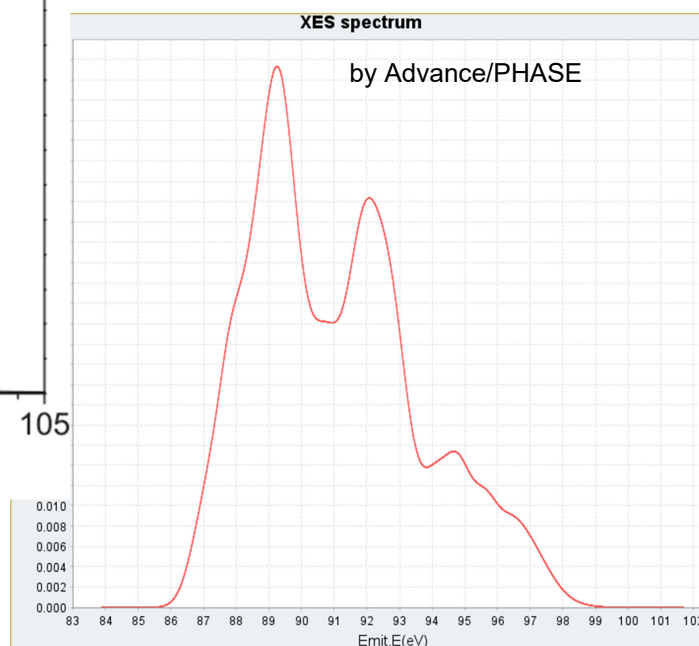
参考文献: <https://iopscience.iop.org/article/10.1149/2.0551903jes/pdf>

Andrey Lyalin et al., J. Electrochem. Soc. 166, A5362 (2019).

(Open access)



Distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 License



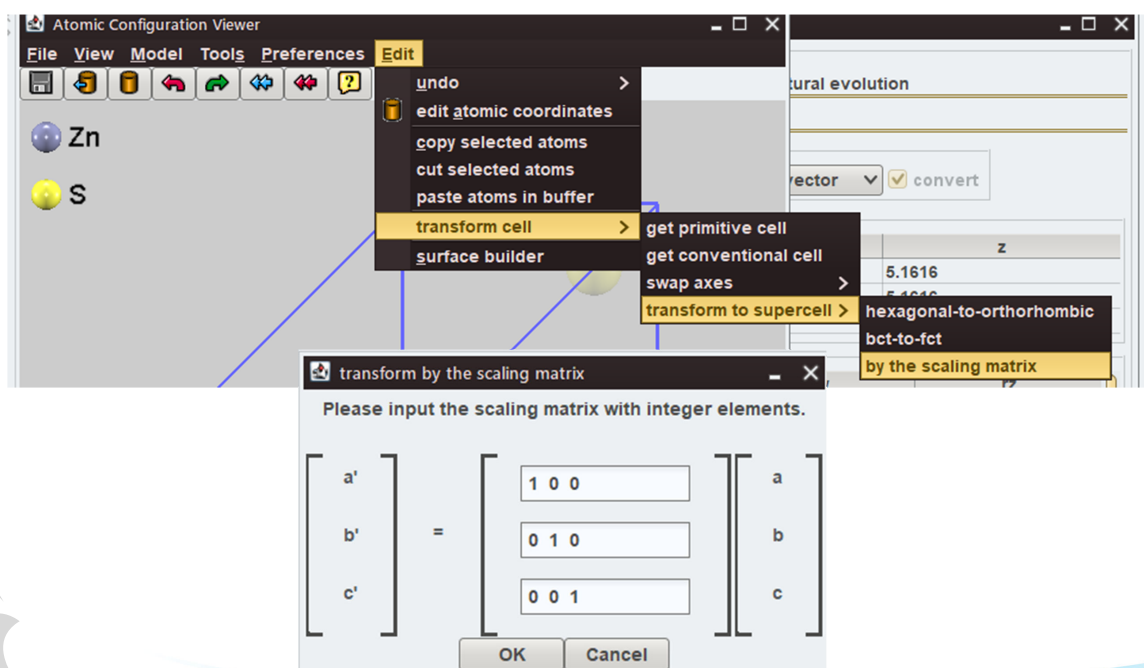
Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

29

GUIの機能増強

例: transform cell機能

get primitive cell, get conventional cell, swap axes (軸の交換),
transform to supercell (hexagonal-to-orthorhombic, bct-to-fct, by the scaling matrix)



Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

MI機能の改良

- Materials Projectの更新、特にRetirement of Legacy Materials Project in 2025への対応

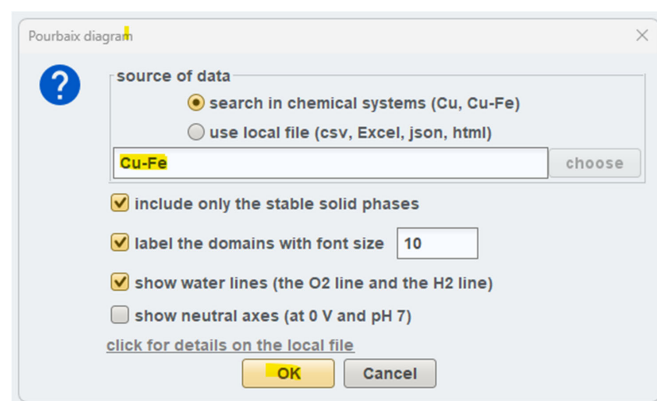
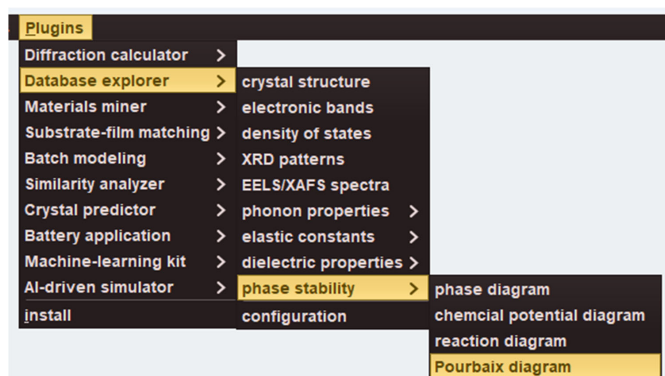
Materials Projectからのお知らせ: Retirement of Legacy Services

We are beginning the process of closing down our legacy services (website and API). The apps and features on our legacy website that have already been ported are now disabled and link to their respective counterparts on our new website. The legacy services will be fully retired on September 30, 2025. To raise awareness we will temporarily disable them starting in April 2025. The brownouts are planned to occur on the following dates and times:

April 15 16:00 UTC - April 16 16:00 UTC (1 day)
 May 13 16:00 UTC - May 15 16:00 UTC (2 days)
 June 17 16:00 UTC - June 20 16:00 UTC (3 days)
 August 5 16:00 UTC - August 12 16:00 UTC (1 week)

2025年9月30日以降、16桁のAPI keyが使用できなくなるので、すべての機能において32桁API keyを使用しなければなりません。

・ Pourbaix diagramのデータ検索・図の作成



- ・ Pourbaix図は、固体の水中安定性を示します。
- ・ Pourbaix図は、**固体の形成エネルギー**（単体 元素→ 固体）、**イオンの形成エネルギー**（固体 → 水中イオン）から作成します。
- ・ Materials Projectから形成エネルギーのデータをダウンロードしてPourbaix図を作成することが可能ですし、ローカルなデータを読み込んでPourbaix図を作成することも可能です。



まとめ

本日は、第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE の最新動向について、「高速化」「自動化」「機械学習」をキーワードにご紹介しました。

Advance/PHASEは、これからも進化を続け、材料開発の最前線を走り続ける研究者・技術者の皆様のニーズに、よりの確にお応えできるよう、製品とサービスの向上に努めてまいります。

価格および関連サービスのご紹介

◇価格について

■Advance/PHASE(並列数無制限・シングルライセンス)

年間ライセンス	→	¥1,000,000-(税抜)
買取ライセンス	→	¥3,000,000-(税抜)
保守サポート	→	¥500,000-(税抜)

- 保守サポートサービス(最新バージョンの使用権、E-mailによる問い合わせ対応)
- 買取ライセンスの料金には初年度の保守サポートを含みます。
次年度以降の保守サポートは上記料金が必要となります。
- 教育機関向け(アカデミック版)はライセンス料金半額。

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

◇価格について

■Advance/PHASE/UL(並列数・ジョブ数無制限)

年間ライセンス	→	¥2,000,000-(税抜)
買取ライセンス	→	¥6,000,000-(税抜)
保守サポート	→	¥1,000,000-(税抜)

- 保守サポートサービス(最新バージョンの使用権、E-mailによる問い合わせ対応)
- 買取ライセンスの料金には初年度の保守サポートを含みます。
次年度以降の保守サポートは上記料金が必要となります。
- 教育機関向け(アカデミック版)はご相談下さい。

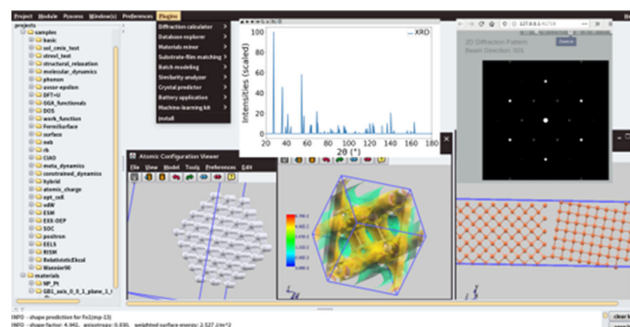
Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

関連サービスのご案内

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

Advance/PHASE関連サービス

- 第一原理計算ソフトウェアAdvance/PHASE
→並列数無制限。格安のジョブ数無制限ライセンスもご用意。ご自分で計算したい方向け。
- Advance/PHASE受託解析・カスタマイズ
→特定のテーマにフォーカスしたい方。
- 第一原理計算コンサルティングサービス **New!**
→専門家の知見を取り入れて第一原理計算の活用をより深めたい方



Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

[ホーム](#) / [技術情報](#) / [解析事例集](#)

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

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.



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。