

Advance / NanoLabo

Developed by AdvanceSoft Corp. (2018-2022)

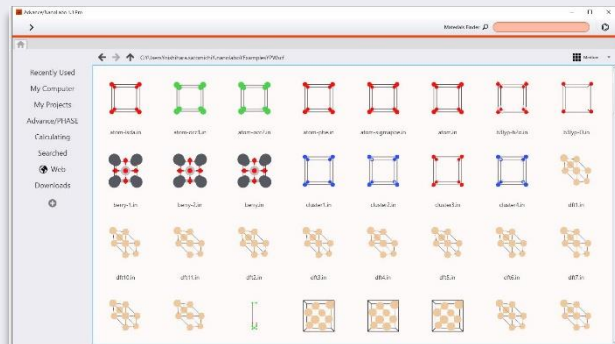
<http://www.advancesoft.jp>

Advance / NanoLabo

Advance/PHASE (当社製品) および、Quantum ESPRESSO^{※1} や LAMMPS^{※2} などのオープンソースの材料解析ソフトウェアに対応した統合 GUI です。Materials Project^{※3} などの材料データベースを検索し、モデリング・計算条件設定が極めて容易に行えます。計算実行後は、結果を瞬時にグラフィックス表示できます。

特徴

- 結晶構造のアイコン表示 (右図)
- 化学式入力による材料データベース検索
- 結晶、表面、界面、分子に対するモデリング
- オープンソース計算エンジンのサポート
- バンド構造、振動モード、反応経路残像表示、動力学アニメーションなどの多彩な可視化機能



機能

Modeling

| | |
|----------|---|
| 材料データベース | Materials Project ^{※3} PubChem ^{※4} |
| 結晶系 | セル並進移動 スーパーセル 不純物置換 格子欠陥 空間群判定 Primitive セル変換 Standard セル変換 |
| 表面・界面系 | 任意の方位の表面 表面への分子吸着 不整合界面 [Pro のみ] |
| 分子系 | 有機分子の描画 溶媒分子充填 高分子モデル [Pro のみ] |

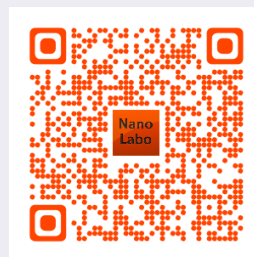
Calculation

| | |
|--------|---|
| 計算エンジン | Advance/PHASE Quantum ESPRESSO ^{※1} LAMMPS ^{※2} |
| 計算機能 | SCF 計算、構造最適化 Hybrid 汎関数、vdW 補正 バンド構造、状態密度 (PDOS 電卓) 電荷密度などの可視化 第一原理 MD、古典 MD 熱伝導率、粘性係数、拡散係数 TD-DFT、XAFS/EELS Phonon (バンド構造、状態密度) NEB 法、仕事関数 (ESM 法) |
| 計算制御 | ジョブスケジューラ NanoLabo-API for Python ^{※5} |
| リソース | ローカルマシン 計算サーバー (SSH 接続) クラウド |

動作環境

| | |
|--------------|---|
| OS | - Windows 10 (64 bit) - CentOS 7 (64 bit) - macOS 10.15 |
| マシンスペック (推奨) | CPU : Intel Core i7 以上 メモリ : 10 GB 以上 |

オンラインマニュアル

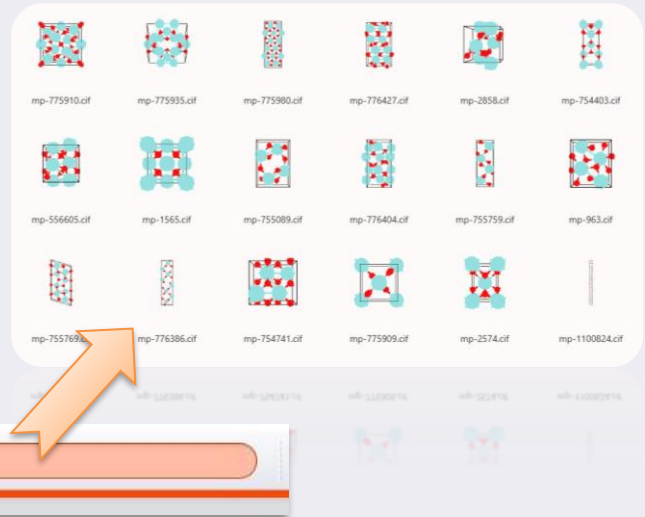


※1 Quantum ESPRESSO は、GPL ライセンスにて配布されている第一原理計算のオープンソースソフトウェア。 (<https://www.quantum-espresso.org>)
※2 LAMMPS は、GPL ライセンスにて配布されている分子動力学計算のオープンソースソフトウェア。 (<https://lammps.sandia.gov>)
※3 Materials Project は、Lawrence Berkeley National Laboratory にて開発された材料インフォマティクス用のデータベース。 (<https://materialsproject.org>)
※4 PubChem は、National Center for Biotechnology Information にて開発された生化学用のデータベース。 (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>)
※5 Advance/NanoLabo のオンラインマニュアルにて API 仕様を公開。 (<https://nanolabo-doc.readthedocs.io/ja/latest/python.html>)

Modeling

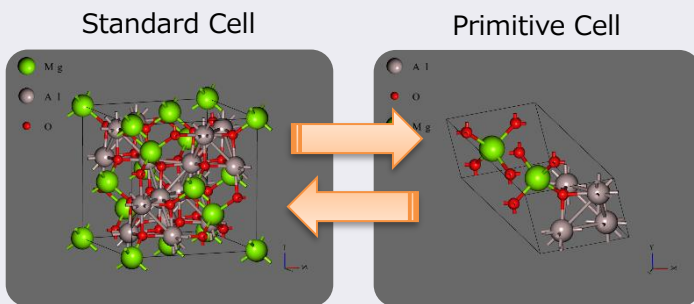
1. 材料データベース

- ✓ 検索フィールドに、化学式・分子構造(SMILES)・分子名を入力すると、結晶構造または分子構造を取得できる。
- ✓ インターネット経由で以下のデータベースに接続
 - 結晶構造：Materials Project
 - 分子構造：PubChem

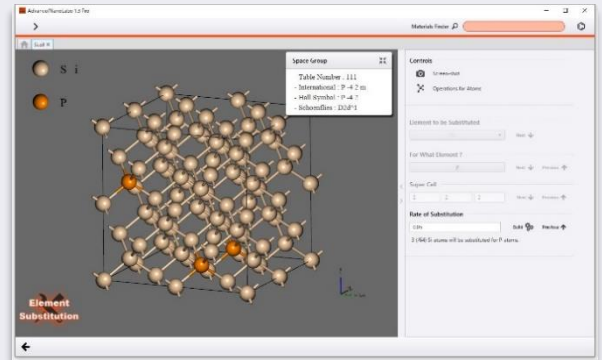


2. 結晶系

セル変換 (スピネル)

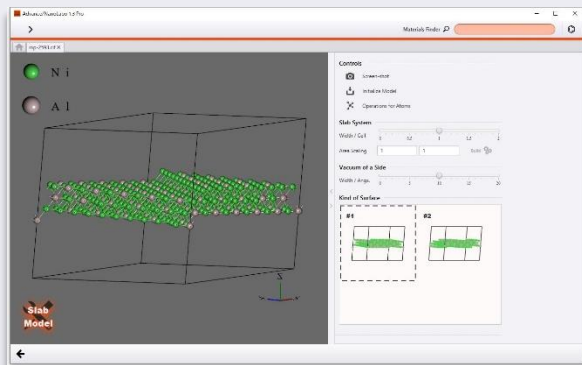


不純物置換 (SiへのPドーピング)



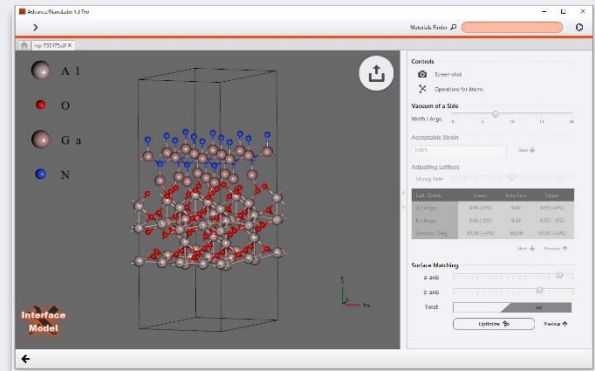
3. 表面・界面系

表面モデル (Ni₃Al [556]表面)



当社独自の SlabGenom アルゴリズムにより、任意の表面状態を生成可能。

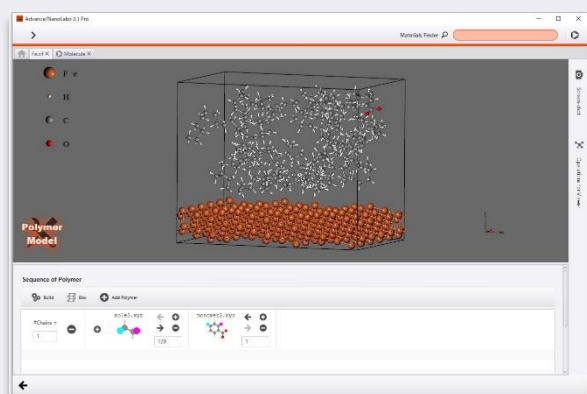
界面モデル (Al₂O₃/GaN 界面)



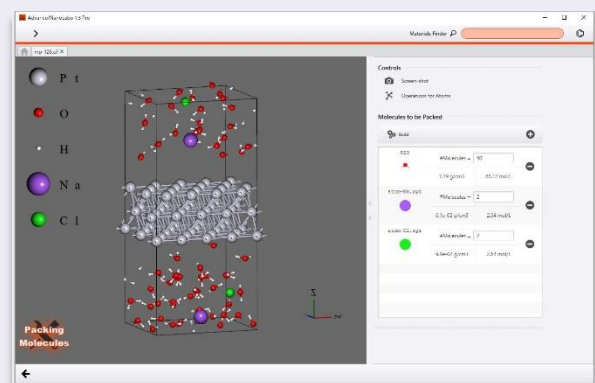
連分数アルゴリズムによる格子マッチング。古典分子力場による面間距離の自動最適化。

4. 分子系

高分子モデル (金属スラブとの界面も生成可能)



溶媒分子充填 (Pt スラブ周囲への NaCl aq 充填)



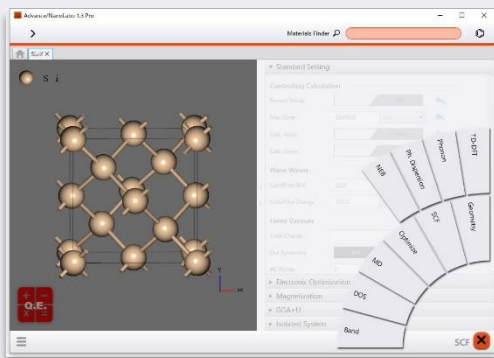
独自のパッキングアルゴリズムにより、任意の溶媒分子・イオンを高密度に配置可能。

Calculation

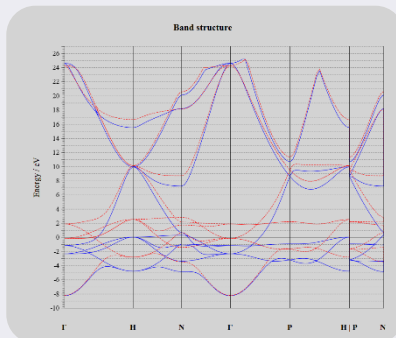
Quantum ESPRESSO

- ✓ 結晶構造から直ちに、適切な入力ファイルを自動生成。
- ✓ ユーザー自身が面倒な計算条件の設定を行う事なく、各種計算を実行可能。
- ✓ SCF 計算、構造最適化、バンド構造、状態密度、第一原理 MD、TD-DFT、Phonon、NEB 法に対応。
- ✓ 計算の進捗状況および結果を可視化。(種々のポスト処理が利用可能)

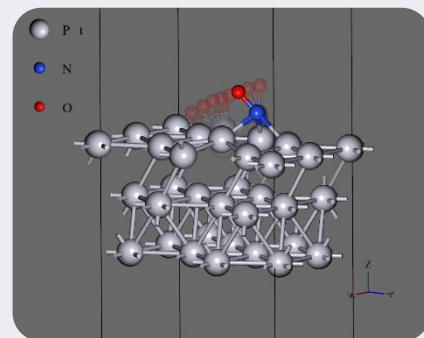
Quantum ESPRESSO 用入力画面



バンド構造図のプロット



NEB 反応経路の残像表示



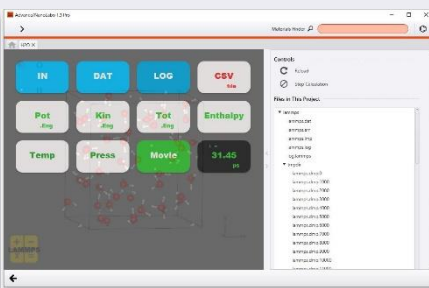
LAMMPS

- ✓ Lennard-Jones、Charge、OPLS-AA、ReaxFF、Terstoff、EAM、MEAM、Neural Network 力場^{*1}に対応。
- ✓ 有機分子に対して、OPLS-AA の力場パラメータを自動的にアサイン。
- ✓ 多段階での計算スキームが設定可能。(e.g. NVT アンサンブルで 100ps 運動させたのち、NPT アンサンブルに切り替え)
- ✓ 計算実行の最中であっても、動力学の様子をアニメーション表示可能。(MP4 形式にて保存可)

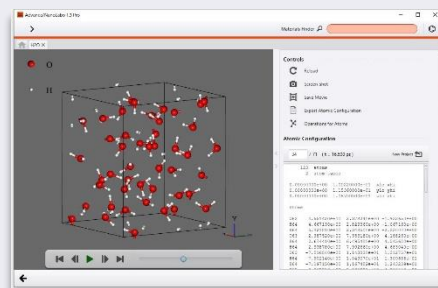
多段階計算スキーム設定画面



計算項目の一覧表示



アニメーション表示



※1 Neural Network 力場のご利用に当たっては、別途 Advance/NeuralMD のご購入が必要になります。

計算リソース

ローカルマシン上での計算実行

- built-in ジョブスケジューラでの計算管理
- PBS および SLURM の利用 (Linux 版のみ可)

計算サーバーへのジョブ投入

- SSH 接続にて Linux サーバー上で、計算実行
- PBS および SLURM によるジョブ管理

クラウドサービスの利用

- Rescale ScaleX Platform^{※2}
 - Rescale, Inc.が提供する SaaS 型クラウド環境 (<https://www.rescale.com/jp/>)
 - ローカルマシンにインストールされた NanoLabo からクラウドにジョブ投入
- Exabyte.io^{※2}
 - Exabyte Inc.が提供する SaaS 型クラウド環境 (<https://www.exabyte.io/>)
 - プラットフォーム上のリモートデスクトップにて NanoLabo が利用可能

※2 クラウドサービスのご利用には、別途料金が発生します。

Roadmap

| リリース予定時期 | バージョン | 実装予定の機能 |
|----------|-------|---|
| 2022/02 | 2.4 | Open Catalyst Project の汎用力場 (グラフニューラルネットワーク)に対応 |
| 2022/05 | 2.5 | 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法によるニューラルネットワーク力場の生成機能 |
| 2022/09 | 2.6 | LAMMPS インターフェースの機能拡張 |
| 2023 以降 | x.x | 弾性係数 (剛性テンソル) ^{※1} NWChem インターフェース 3D-RISM/ESM-RISM ^{※1} 熱力学量および相図の計算 ^{※1} 合金 (クラスター展開法) ^{※1} XPS スペクトル ^{※1} ... |

※1 Advance/NanoLabo Pro でのみご利用可能な機能です。

新製品情報

- ✓ Advance/NanoLabo のモデリング機能を Python スクリプトから利用可能な新製品 **Advance/NanoModeler (仮)** を、2023 年にリリース予定！！
- ✓ 不純物置換モデル や 不整合界面モデル について、条件の異なる多数の構造を自動生成。
- ✓ Material Informatics の研究等に最適。



Licensing

ライセンス形態

| OS | ライセンス形態 |
|---------|------------------------|
| Windows | ノードロック (リモートデスクトップ利用可) |
| Linux | フローティング |
| macOS | ノードロック (リモートデスクトップ利用可) |

ライセンス価格

| 製品 | 年間(企業・国研) | 年間(大学) | 買取(企業・国研) | 買取(大学) |
|------------------------------------|---------------------|---------------------|----------------------|----------------------|
| Advance/NanoLabo | 50 万円 ^{※3} | 25 万円 ^{※3} | 150 万円 ^{※3} | 75 万円 ^{※3} |
| Advance/NanoLabo Pro ^{※2} | 90 万円 ^{※3} | 45 万円 ^{※3} | 270 万円 ^{※3} | 135 万円 ^{※3} |

※2 Advance/NanoLabo Pro では不整合界面および高分子のモデリング機能をご利用になれます。

※3 3 本以上の同時購入で、ライセンス価格がお得になります。詳細は、営業担当者までご連絡下さい。

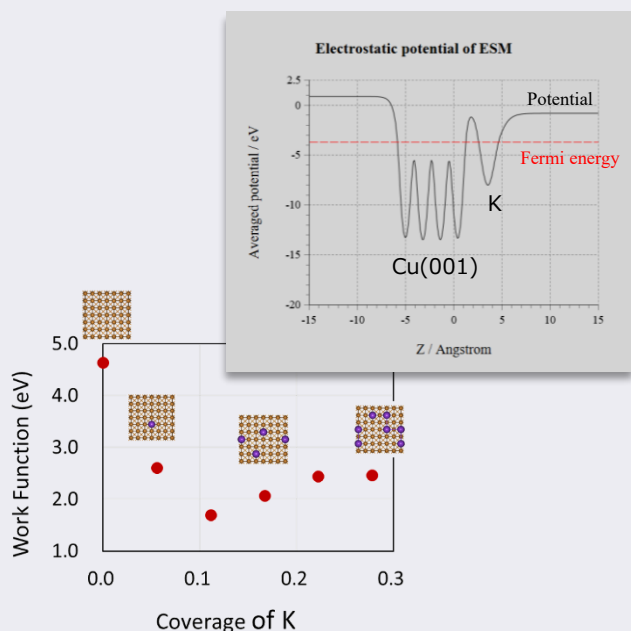
トライアルライセンス

お一人様につき 1 ヶ月間、トライアルライセンスを無償でご利用になれます。

Cases

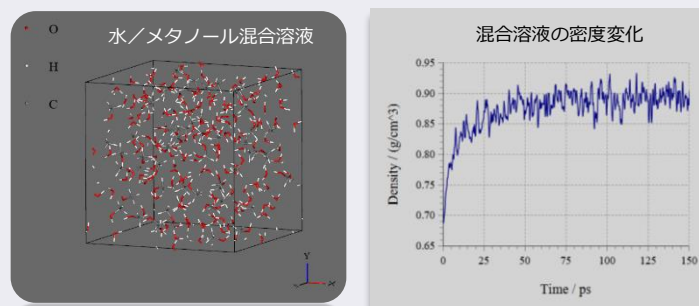
ESM 法による K/Cu(001)系の仕事関数計算

Effective Screening Medium (ESM)法により、カリウムの吸着した Cu(001)表面における仕事関数を計算しています。被覆率に依存した仕事関数の変化が、シミュレーションできます。



水/メタノール混合溶液の分子動力学計算

水/メタノールの混合溶液 (体積比 1:1) のモデルを作成して、常温常圧 (300K, 1bar) の条件下で NPT アンサンブルによる分子動力学シミュレーションをしています。分子力場には OPLS-AA を用いています。

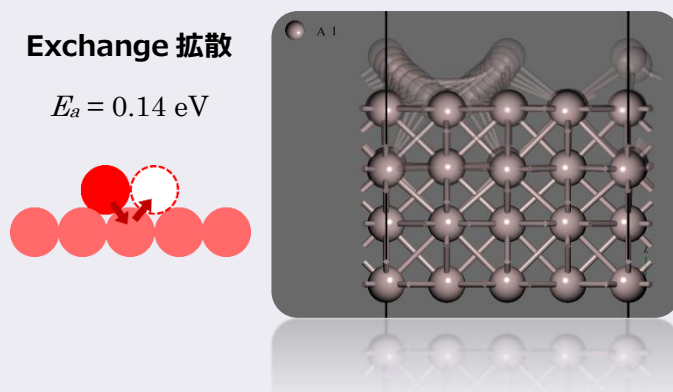
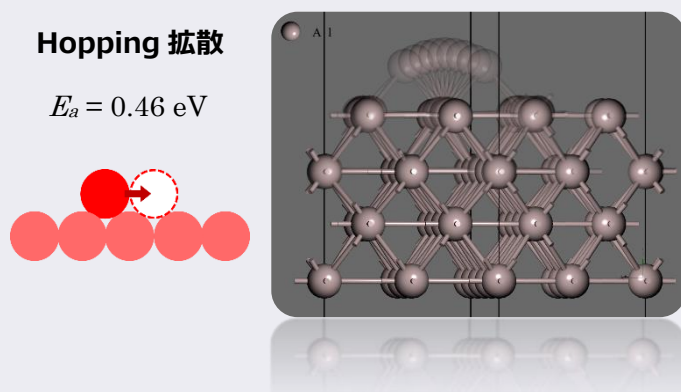


| 溶液 | 密度 (計算値) | 密度 (実験値) |
|---------|------------------------|---------------------------|
| 水 | 1.00 g/cm ³ | 1.00 g/cm ³ ※1 |
| メタノール | 0.75 g/cm ³ | 0.79 g/cm ³ ※1 |
| 水/メタノール | 0.89 g/cm ³ | 0.93 g/cm ³ ※2 |

※1 S. Kim, et al: Nucleic Acids Res. 2019; 47(D1):D1102-1109.
※2 日本化学会(編): "改訂 5 版 化学便覧 基礎編 II", 丸善 (2004)

NEB 法による Al アドアトムの拡散経路解析

NEB 法を用いて、Al(001)表面上におけるアドアトムの拡散過程を解析しています。Hopping および Exchange の 2 つの拡散過程を計算して、活性化エネルギーを算出しています。



アドバンスソフト株式会社

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

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目 3 番地

新お茶の水ビルディング 17 階西

TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580

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

E-mail: office@advancesoft.jp

