

# Advance! NanoLabo

Developed by AdvanceSoft Corp. (2018 - 2024)  
<https://www.nanolabo.advancesoft.jp>

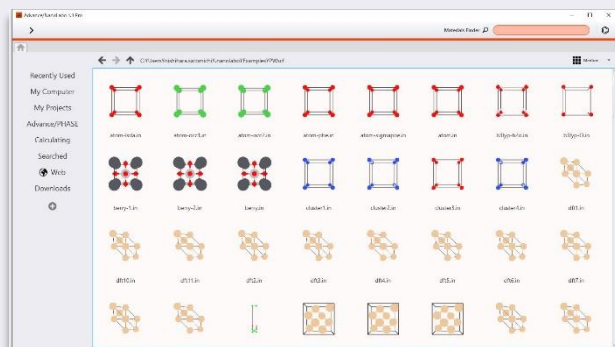


# Advance / NanoLabo

Advance/PHASE (当社製品) および、Quantum ESPRESSO<sup>※1</sup> や LAMMPS<sup>※2</sup> 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<sup>※3</sup> 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 <sup>※3</sup> PubChem <sup>※4</sup>
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 <sup>※1</sup> LAMMPS <sup>※2</sup> 、ThreeBodyTB <sup>※5</sup>
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 <sup>※6</sup>
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	<ul style="list-style-type: none"><li>- Windows 10/11 (64 bit)</li><li>- AlmaLinux 8 (64 bit)</li><li>- macOS 13 以降 (Intel/ARM64)</li></ul>
マシンスペック (推奨)	CPU : Intel Core i7 以上 メモリ : 10 GB 以上

製品紹介動画

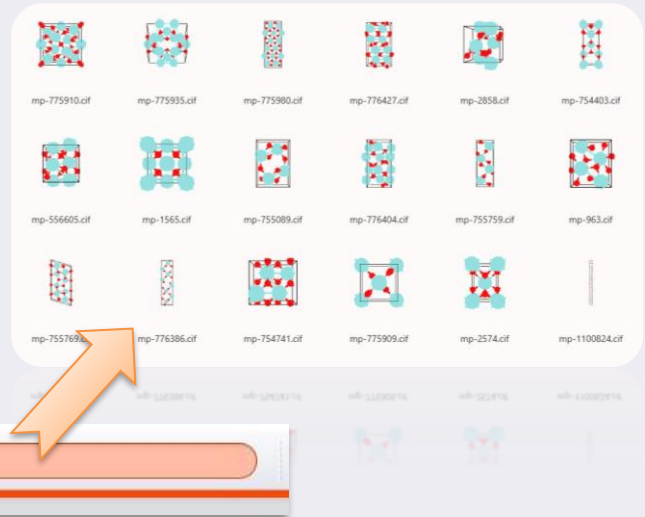


※1 Quantum ESPRESSO は、GPL ライセンスにて配布されている第一原理計算のオープンソースソフトウェア。(https://www.quantum-espresso.org)  
※2 LAMMPS は、GPL ライセンスにて配布されている分子動力学計算のオープンソースソフトウェア。(https://lammps.sandia.gov)  
※3 Materials Project は、Lawrence Berkeley National Laboratory にて開発された材料インフォマティクス用のデータベース。(https://materialsproject.org)  
※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 ThreeBodyTB は、NIST にて開発された汎用 Tight-Binding 法のオープンソースソフトウェア(https://pages.nist.gov/ThreeBodyTB.jl/)  
※6 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

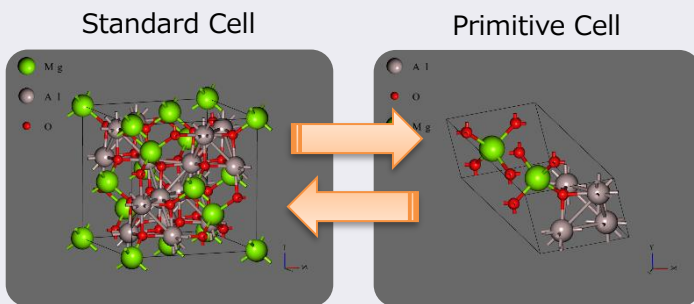
## 1. 材料データベース

- ✓ 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

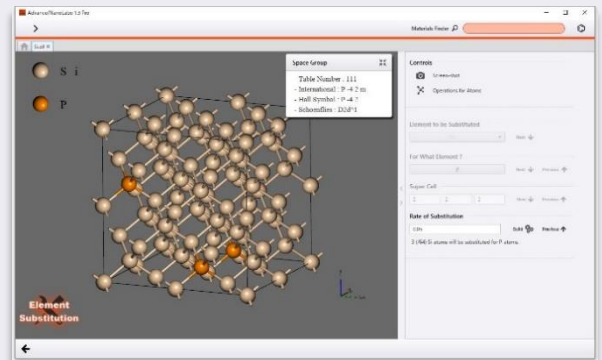


## 2. 結晶系

### セル変換 (スピネル)

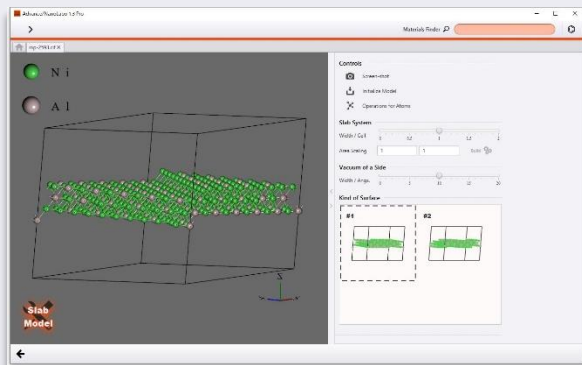


### 不純物置換 (Si への P ドーピング)



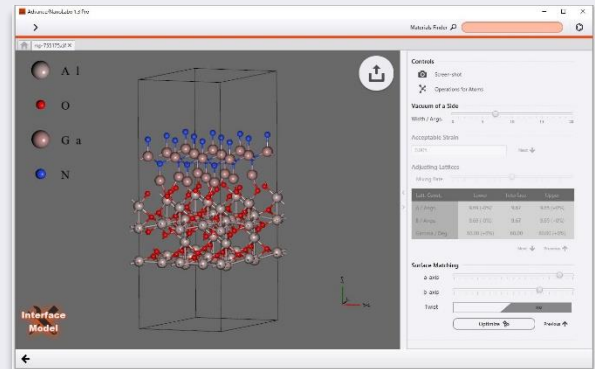
## 3. 表面・界面系

### 表面モデル (Ni<sub>3</sub>Al [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。

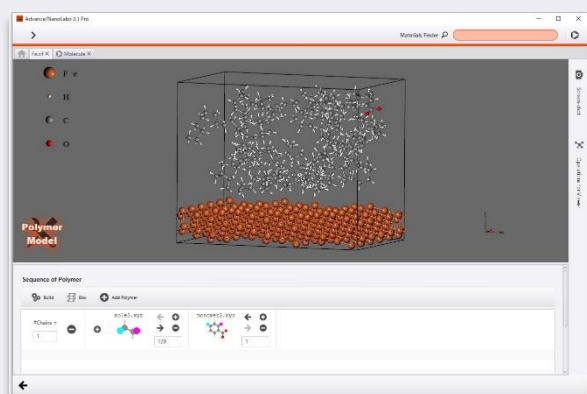
### 界面モデル (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/GaN 界面)



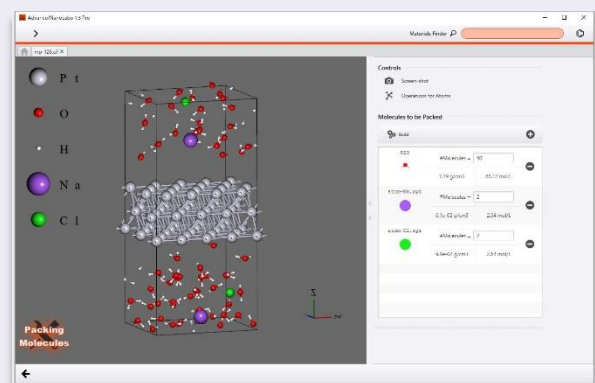
連分数アルゴリズムによる格子マッチング。古典分子力場による面間距離の自動最適化。

## 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)



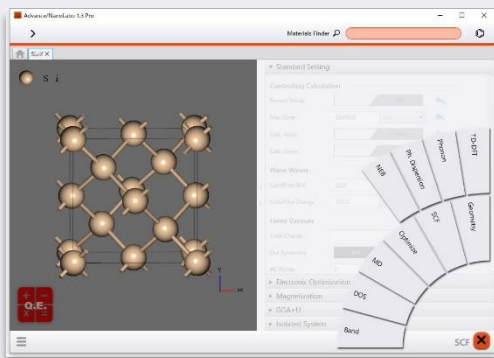
独自のパッキングアルゴリズムにより、任意の溶媒分子・イオンを高密度に配置可能。

# Calculation

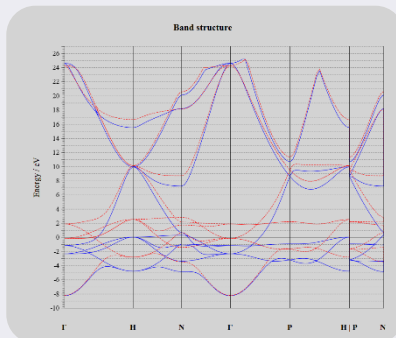
## Quantum ESPRESSO

- ✓ 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)

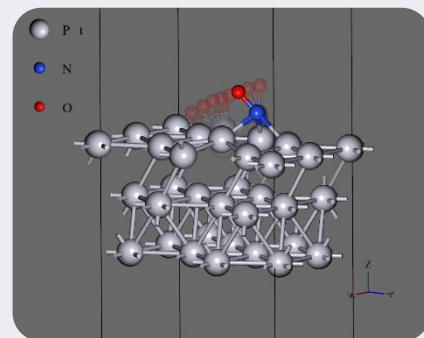
Quantum ESPRESSO 用入力画面



バンド構造図のプロット



NEB 反応経路の残像表示



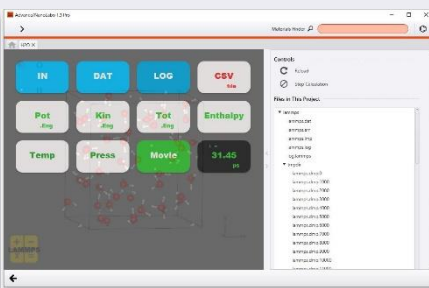
## LAMMPS

- ✓ Lennard-Jones、Charge、OPLS-AA、ReaxFF、 Tersoff、EAM、MEAM、Neural Network 力場<sup>※1</sup>に対応。
- ✓ 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)
- ✓ 外部電場、指定原子に対する外力および並進移動、セル変形。原子グループの視覚的な定義。

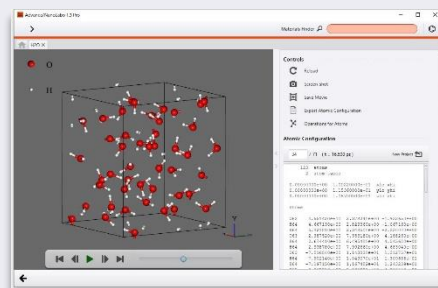
多段階計算スキーム設定画面



計算項目の一覧表示



アニメーション表示



※1 Neural Network 力場については、当社製品である Advance/NeuralMD および オープンソースの Graph Neural Network 力場がご利用になれます(詳細は次ページに記載)。

## 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, SLURM, PJM 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, SLURM, PJM によるジョブ管理

### クラウドサービスの利用

- サイエンスクラウド GPU<sup>※2</sup>
  - HPC システムズが提供するベアメタル型クラウド環境 (<https://www.hpc.co.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
- Mat3ra<sup>※2</sup>
  - Exabyte Inc.が提供する SaaS 型クラウド環境 (<https://www.mat3ra.com>)
  - 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。

# Graph Neural Network Potential

周期表の幅広い元素に対応した汎用 Graph Neural Network 力場が利用できます。具体的には、オープンソースソフトウェアとして公開されている **Open Catalyst**、**M3GNet**、**CHGNet** の 3 種類<sup>※1</sup> です。いずれも事前学習済みモデルが公開されているため、ユーザーが自ら Neural Network の最適化を行う必要が無く、種々の系に対して直ちに分子動力学シミュレーションが実施できるというメリットがあります。

その他に、ファインチューニングした Graph Neural Network 力場モデルの読み込みや、当社製品である Advance/NeuralMD にて作成した Neural Network 力場の運用も可能です。

※1 Open Catalyst (<https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp>)、M3GNet (<https://github.com/materialsvirtuallab/matgl>)、CHGNet (<https://github.com/CederGroupHub/chgnet>)は、いずれも Python で実装されており、LAMMPS からこれらの Python モジュールを呼び出して構造最適化計算や分子動力学計算を実行する仕組みになっています。

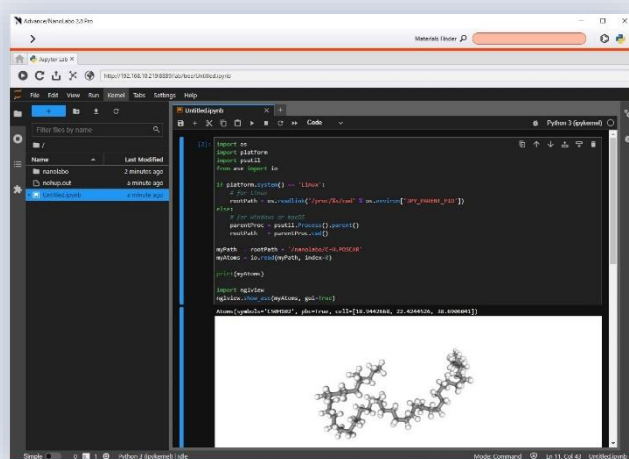
## Jupyter Interface for NanoLabo

Advance/NanoLabo の画面上で Jupyter Lab<sup>※2</sup> を表示および操作することができるサービスです。Advance/NanoLabo でモデリングした構造ファイルを Jupyter Lab が動作しているサーバーへ転送して、ASE<sup>※3</sup> の Atoms オブジェクトを生成する Python コードを出力します。

株式会社 Preferred Computational Chemistry が提供する汎用原子レベルシミュレーションクラウドサービス **Matlantis** (<https://matlantis.com/ja/>) との連携も可能です。

※2 Jupyter Lab (<https://jupyter.org>)はウェブベースの統合開発環境ですが、ここでは主として Python をカーネルとした Notebook としての運用を想定しています。

※3 ASE (Atomic Simulation Environment; <https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>)は、第一原理計算や分子動力学計算を実施するための Python モジュールとして広く使われています。



## 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 <sup>※5</sup>	25 万円 <sup>※5</sup>	150 万円 <sup>※5</sup>	75 万円 <sup>※5</sup>
Advance/NanoLabo Pro <sup>※4</sup>	90 万円 <sup>※5</sup>	45 万円 <sup>※5</sup>	270 万円 <sup>※5</sup>	135 万円 <sup>※5</sup>
Jupyter Interface	40 万円	20 万円	120 万円	60 万円

※4 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。

※5 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。

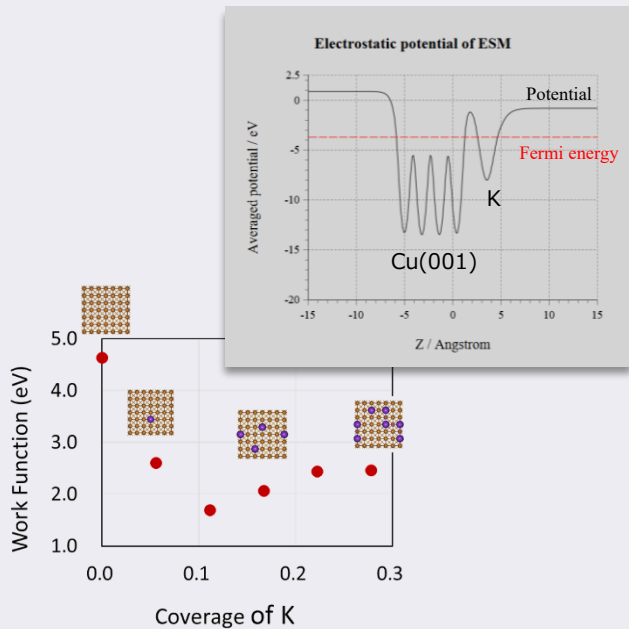
### トライアルライセンス

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

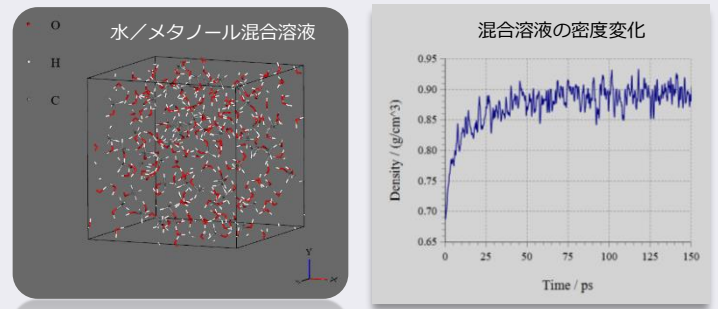
## ESM 法による K/Cu(001)系の仕事関数計算

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。

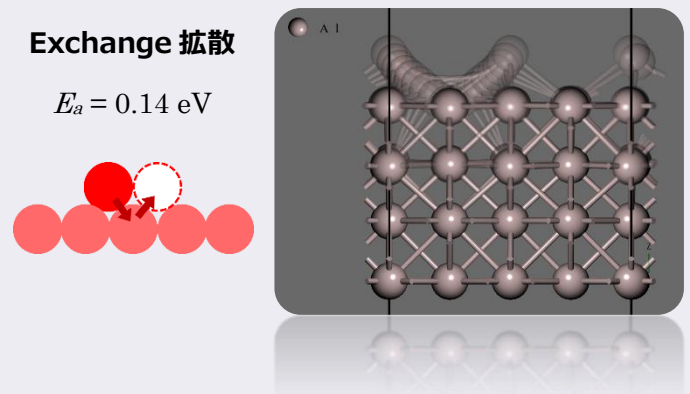
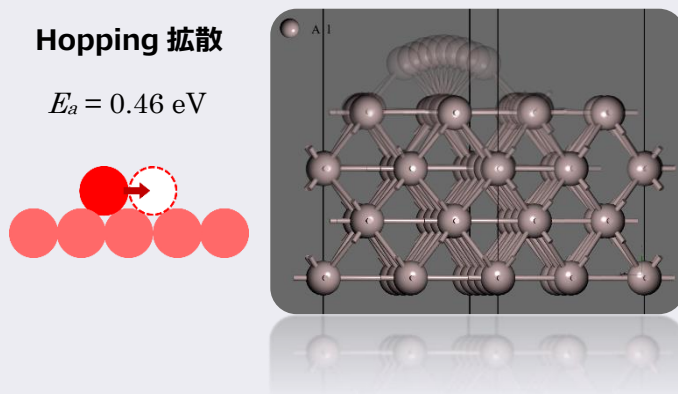


溶液	密度 (計算値)	密度 (実験値)
水	1.00 g/cm <sup>3</sup>	1.00 g/cm <sup>3</sup> ※1
メタノール	0.75 g/cm <sup>3</sup>	0.79 g/cm <sup>3</sup> ※1
水/メタノール	0.89 g/cm <sup>3</sup>	0.93 g/cm <sup>3</sup> ※2

※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 E-mail: office@advancesoft.jp

製品ページ: <https://www.nanolabo.advancesoft.jp>

会社ページ: <https://www.advancesoft.jp>

