

The logo for MateriApps, featuring the text "MateriApps" in a white, sans-serif font. A white swoosh underline is positioned beneath the text, starting from the left and ending with a small white circle on the right.

MateriApps

MateriApps LIVE!を用いた計算物質科学

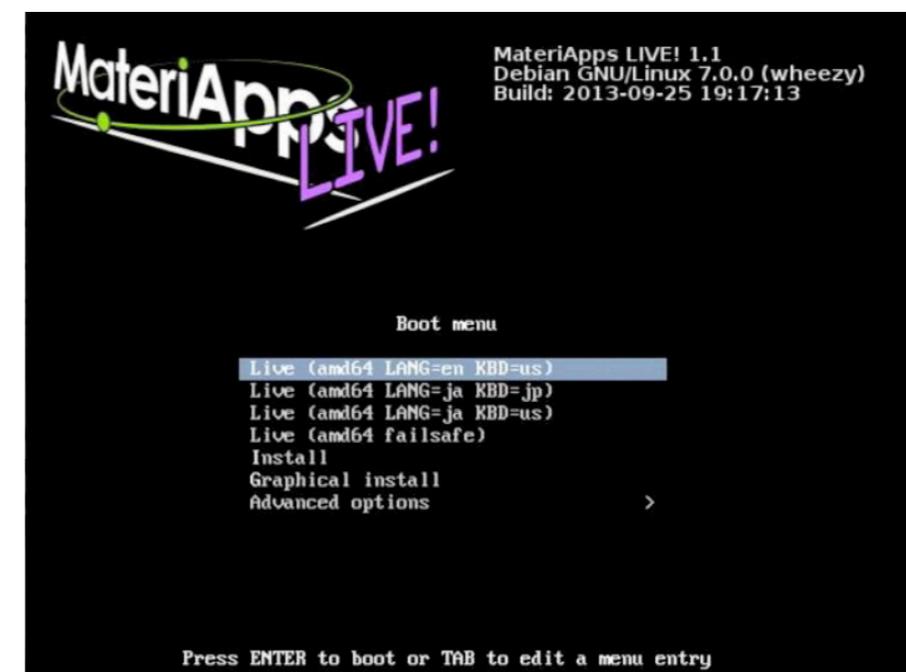
東京大学物性研究所
加藤岳生

The logo for the Center for Nanostructured Interfacial Science and Technology (CNSI), consisting of the letters "CNSI" in a stylized, white, outlined font.

CNSI

MateriApps LIVE!とはなにか？

- USBメモリから直接ブートできる Linux システム (Debian Live Linux)
 - Windows、Mac などで利用可
 - インストール作業なしで物質科学アプリを実行できる
- バージョン1.7公開 (2015年7月27日)
- MateriAppsで紹介している公開アプリ・ツールを収録
 - 2015年4月現在：ABINIT, AkaiKKR, ALPS, CP2K, Feram ,ERmod, GAMESS, Gromacs、OpenMX, Quantum Espresso, SMASH, xTAPP
- MateriApps LIVE! サイトからダウンロード可能



本日はこれを使って、
第一原理計算と分子動力学の
即席実習をします。

本日のメニュー

- MateriApps LIVE!の起動方法の説明
- 第一原理計算手法によるバンド計算の実演
 - 第一原理計算ソフト **OpenMX**
 - 入力補助 C-Tools, 可視化 VESTA, フェルミ面XCrysDen
- 分子動力学による溶液のシミュレーション
 - 汎用分子動力学ソフト **Gromacs** (+ **Modylas**の紹介)
 - 可視化 Rasmol
- 目標
 - 普段、数値計算に縁がない人にも、「私にもできそう」と思ってもらうこと。
 - 学部生の授業に使えるレベルにまでもっていくこと。

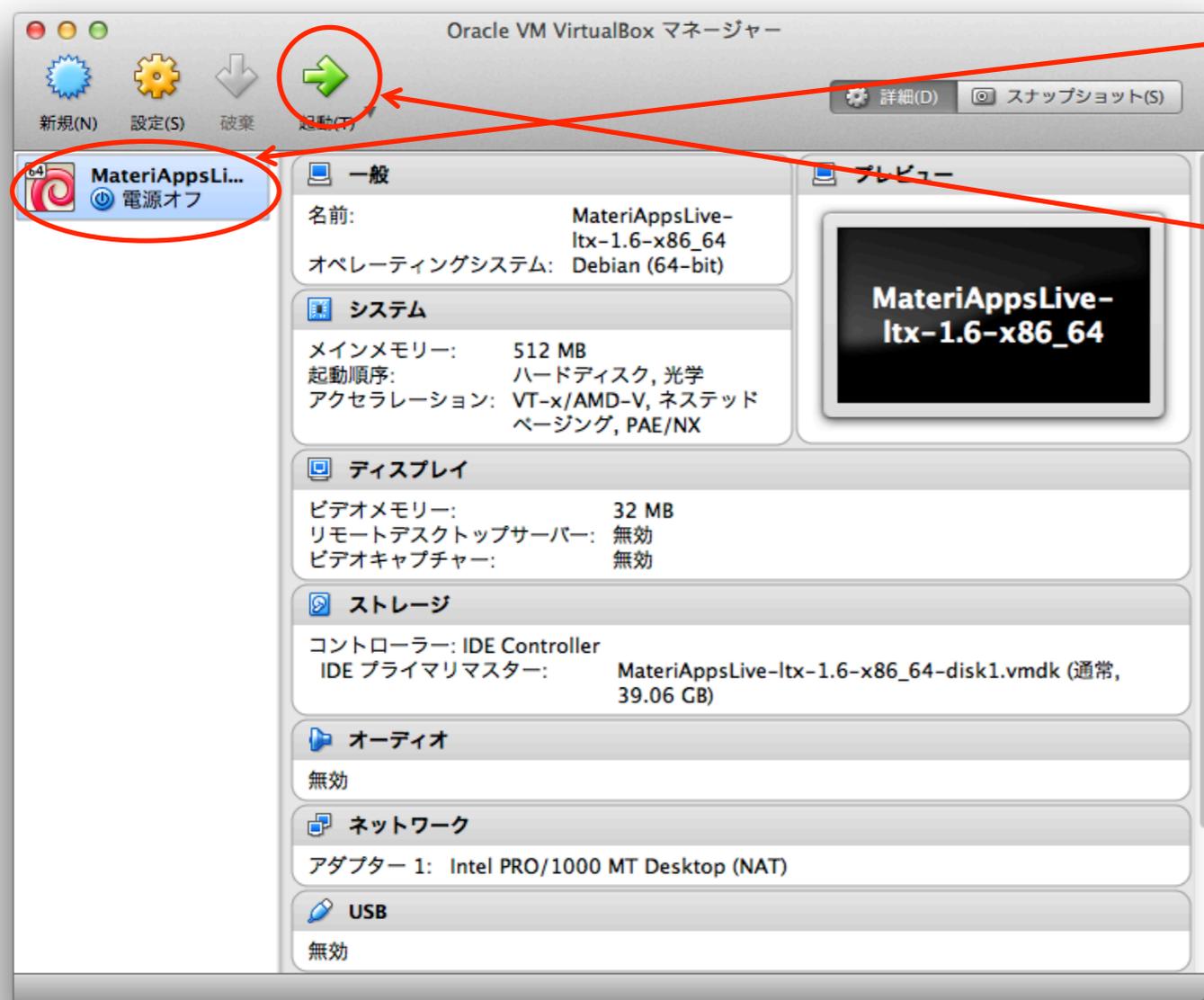
まずははじめてみましょう

- MateriApps Live!が入っているUSBを配布します
 - すべてのファイルをパソコンの適当な場所にコピーしてください
内容：VirtualBox-*****-OSX.dmg (Mac用のインストーラ)
VirtualBox-*****-Win.exe (Windows用のインストーラ)
MateriAppsLive-1.7-x86_64.ova (64bit版仮想ディスク)
MateriAppsLive-1.7-x86_32.ova (32bit版仮想ディスク)
+ マニュアル README.html, github.css
- 起動方法は2種類あります
 1. Virtual Boxから起動する (本日はこちらを説明)
 2. USBを差し込んで再起動する
計算が速いが起動しない時がある ネット設定が必要

Virtual Boxからの起動方法（1）

- インストーラをダブルクリックしてVirtual Boxをインストール
 - Windows版：VirtualBox-*****-Win.exe
 - Mac版：VirtualBox-*****-OSX.dmg
- 途中の質問には適当に答える
- MateriAppsLive-1.7-x86_64.ova をダブルクリック
 - Virtual Boxが起動するはず
 - 起動した画面で「インポート」のボタンを押す
 - 少し時間がかかるが完了するとマネージャーが起動

Virtual Boxからの起動方法 (2)



1. ここを選択

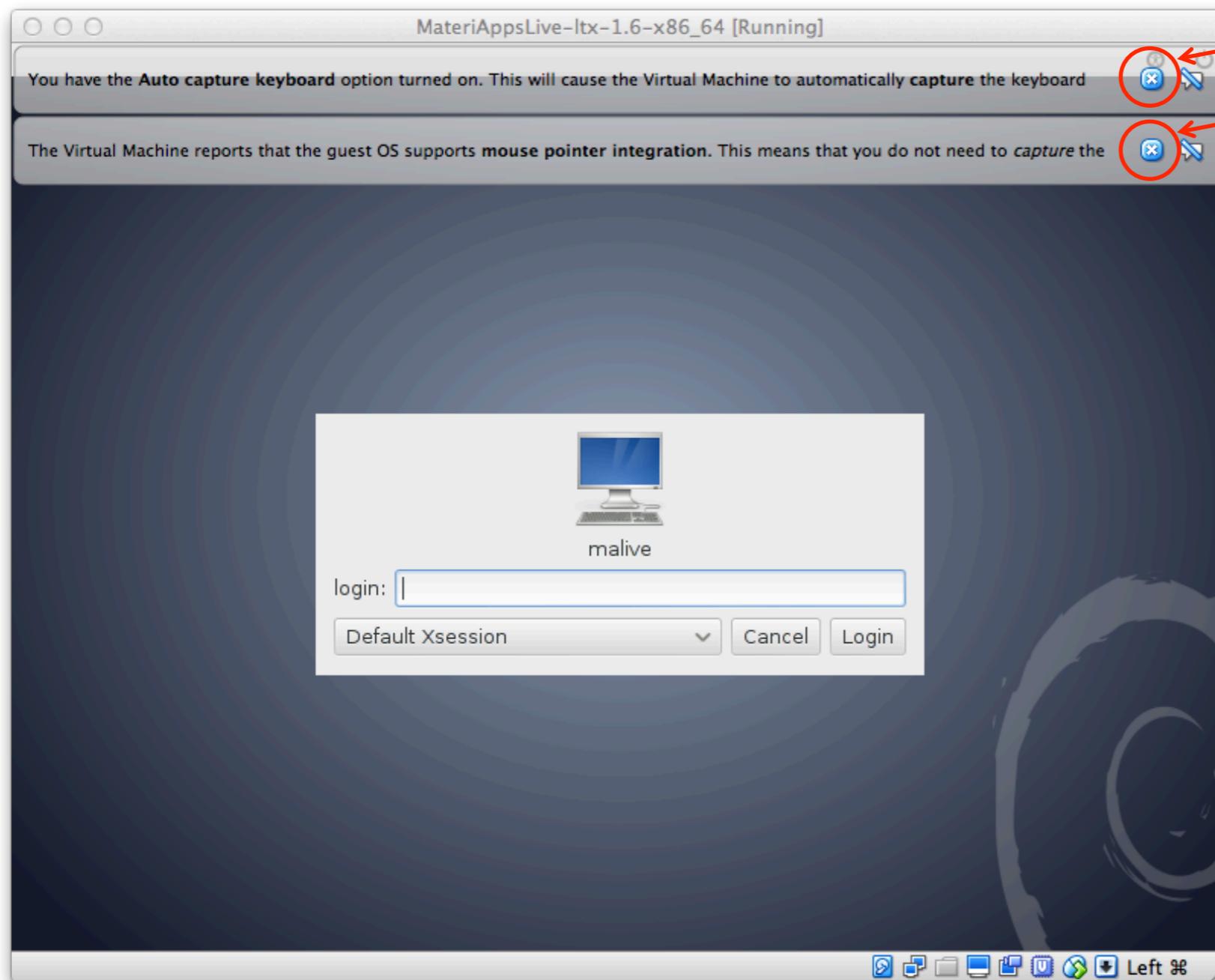
2. 起動ボタンを押す

起動中は操作不要

まれに古いパソコンで起動しない場合がある。そのときは MateriAppsLive-1.7-x86_32.ova (32bit版)をダブルクリック

Virtual Boxからの起動方法（3）

しばらくするとログイン画面がでます



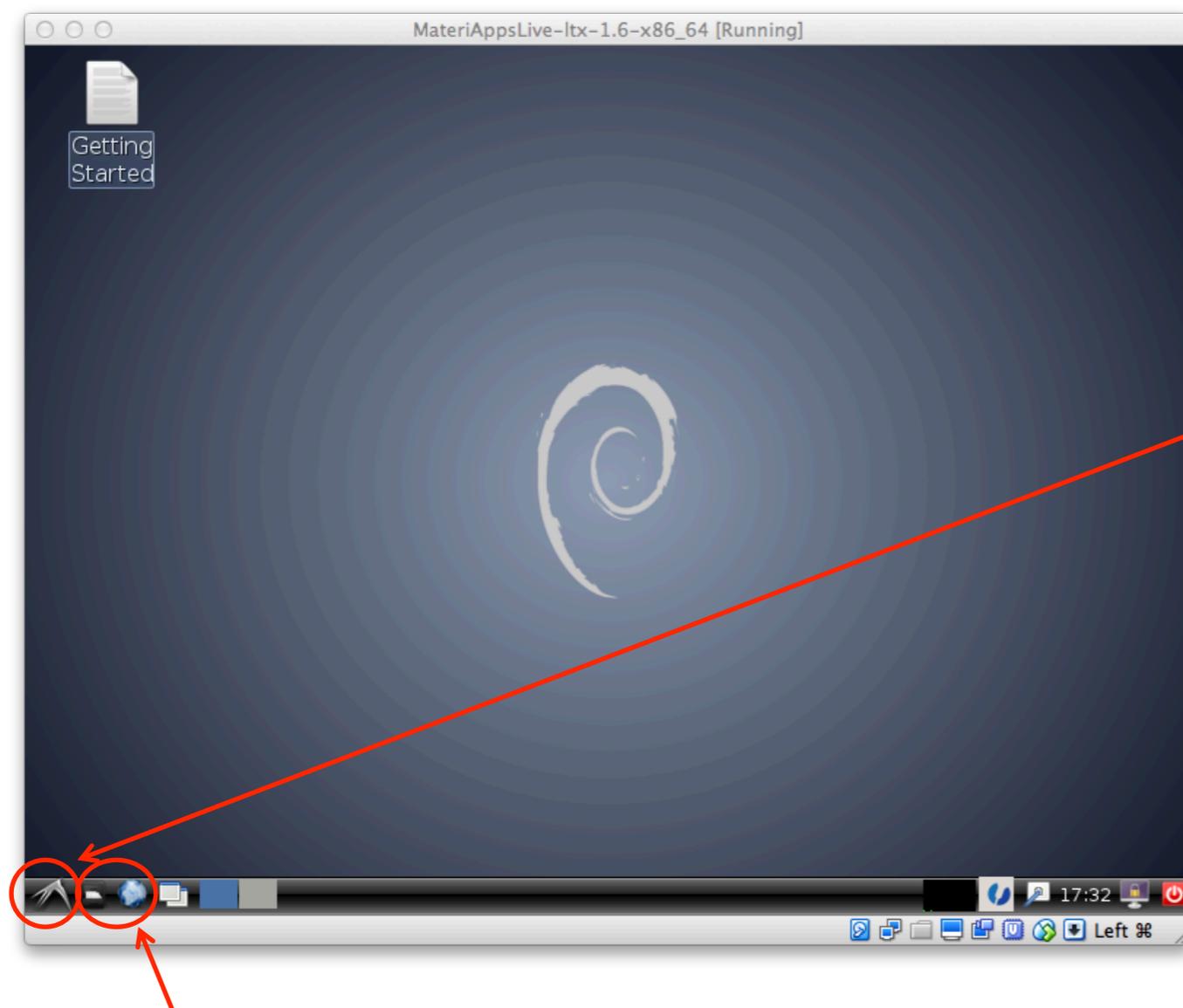
ホップアップが出るが
Xを押すと消える

下記の情報を使って
ログインしてください

ユーザー名
user
パスワード
live

Virtual Boxからの起動方法（４）

下記の画面ができれば、成功です



重要なボタン

スタートメニュー

- ・ Linuxと呼ばれるOSが起動
- ・ 独特な動作をするが、基本的にはWindowsのように直感的な操作が可能

左からファイルマネージャー、Webブラウザ

日本語キーボードの認識

- 日本語キーボードの場合「@」などが正しく打てません
- 「スタートメニュー」 → 「Accessories」 → 「LXTerminal」
- 端末が立ち上がるので「setxkbmap -layout jp」と入力しリターンを押す
- @が正しく入力できることを確認

第一原理計算をしてみましよう

- 電子状態計算（いわゆる第一原理計算）
 - 密度汎関数法に基づく計算。バンド計算のほうが通りがいい？
 - 計算できる量は多岐にわたる：エネルギー、磁化・電気分極、バンド構造、結晶構造や磁気構造、各種生成エネルギー、光学スペクトル、X線スペクトル、・・・
 - 非常に多くのアプリケーションが存在する
 - VASP：もっとも普及しているアプリ。擬ポテンシャル法。有償。
 - Wien2k：全電子計算手法。精度が高い。有償。
 - OpenMX：物性研究所の尾崎泰助先生が中心となって開発。擬ポテンシャル法。無償。
MateriApps Live!に収録されている。

今回行う計算の手順

- 結晶構造のデータ(cifファイル)をデータベースからもってくる
- cifファイルをOpenMXの入力ファイルに変換する
- OpenMXを実行する
- でてきた結果を可視化する
 - 3次元電子密度プロファイル：VESTA
 - フェルミ面：XCrysDen

結晶構造データの取得

- 「スタートメニュー」 → 「MateriApps」 → 「Database」
- 物材機構のMaterial Naviが立ち上がります
- はじめて利用する場合は下記の手順で登録（いつも使うOSのブラウザでOK）
 - 右にある「新規ユーザ」中の「新規ユーザ登録」を押す
 - 「同意する」を押す
 - 必要事項を入力して登録ボタンを押す
 - メールが来るのを確認
- Liveにもどり、MatNaviの「無機材料データベース(AtomWork)」をクリック
- ログインボタンを押す
- ユーザ名（メールアドレス）と設定したパスワードを入力



データベースの画面

うまくいくと、下記の検索画面がでます

使い方は簡単

1. 検索したい物質の元素名を列挙
 例：PbTiO₃ → Pb Ti O
 (元素の間はスペースをあける)

2. 「Search materials」を押す

ダイヤモンドの結晶構造(1)

「C」をキーワードとして検索すると下記の画面がでる

AtomWork

Home > Search materials > List of substances

Search materials - List of found substances

Results 1-13 of 13 for Chemical system: C

Find materials that have ...

No.	Chemical formula	Substance name	Number of elements	Phase identifier			
				Structure type (Prototype)	Pearson symbol	Space group	Space group number
1	C		1	C	hR6	R-3m	166
2	C	lonsdaleite	1	C-b	hP4	P6 ₃ /mmc	194
3	C	graphite	1	C-a	hP4	P6 ₃ /mmc	194
4	C	diamond	1	C	cF8	Fd-3m	227
5	C		1	C	cI16	Im-3m	229
6	[C60]		1	[C60]	cP240	Pa-3	205
7	[C60]		1	[C60]	cF1924	Fm-3m	225
8	[C70]		1	*	mP560	P2 ₁ /m	11
9	[C70]		1	Mg	hP2	P6 ₃ /mmc	194
10	[C70]		1	Cu	cF4	Fm-3m	225
11	[C76]		1	[C82]	mP2	P2 ₁	4
12	[C76]		1	Cu	cF4	Fm-3m	225
13	[C82]		1	[C82]	mP2	P2 ₁	4

Back

Copyright(C) NIMS. All rights reserved.

ダイヤモンド
ここをクリック

たくさんでてくるのは結晶構造の違い

ダイヤモンドの結晶構造(2)

AtomWork [-Search phase diagrams](#) [-Search materials](#)

Home > [Search materials](#) > [List of substances](#) > List of materials

Search materials - List of found materials

Results 1-11 of 11 for Chemical system: C

No.	Structure type	Pearson symbol	Space group	No.
C	C	cF8	Fd-3m	227

*Standardized

All [Crystal Structure](#) [X-ray Diffraction](#) [Properties](#)

Show details of ...

No.	Data Type	Source references	Year
1	Structure X-ray Diffraction	Russ. J. Inorg. Chem.,1979,24,,3-6,Uspenskaya S.I., Kolchemanov N.A., Eliseev A.A., Krynkina S.V.,	1979
2	Structure X-ray Diffraction	Russ. J. Inorg. Chem.,1979,24,,3-6,Uspenskaya S.I., Kolchemanov N.A., Eliseev A.A., Krynkina S.V.,	1979
3	Structure X-ray Diffraction	Russ. J. Inorg. Chem.,1979,24,,3-6,Uspenskaya S.I., Kolchemanov N.A., Eliseev A.A., Krynkina S.V.,	1979
4	Structure X-ray Diffraction	Russ. J. Inorg. Chem.,1979,24,,3-6,Uspenskaya S.I., Kolchemanov N.A., Eliseev A.A., Krynkina S.V.,	1979
5	Structure X-ray Diffraction	Russ. J. Inorg. Chem.,1979,24,,3-6,Uspenskaya S.I., Kolchemanov N.A., Eliseev A.A., Krynkina S.V.,	1979
6	Structure X-ray Diffraction	Russ. J. Inorg. Chem.,1979,24,,3-6,Uspenskaya S.I., Kolchemanov N.A., Eliseev A.A., Krynkina S.V.,	1979
7	Structure X-ray Diffraction	Russ. J. Inorg. Chem.,1979,24,,3-6,Uspenskaya S.I., Kolchemanov N.A., Eliseev A.A., Krynkina S.V.,	1979
8	Structure X-ray Diffraction	Russ. J. Inorg. Chem.,1979,24,,3-6,Uspenskaya S.I., Kolchemanov N.A., Eliseev A.A., Krynkina S.V.,	1979
9	Structure X-ray Diffraction	Acta Crystallogr.,1960,13,,838-850,Parrish W.,	1960
10	Structure X-ray Diffraction	Nature (London),1958,181,,758-759,Grenville Wells H.J., Lonsdale K.,	1958
11	Structure X-ray Diffraction	Am. Mineral.,1957,42,,39-55,Skinner B.J.,	1957

Back

Copyright(C) NIMS. All rights reserved.

いろいろなデータがでてくる

Data Typeに「Structure」とかいてあるものならなんでもいいので、選択する。

ここでは一番上のデータを選ぼう

AtomWork [-Search phase diagrams](#) [-Search materials](#)

Home > [Search materials](#) > [List of substances](#) > [List of materials](#) > Details of selected material

Details of selected material

Structure type	Pearson symbol	Space group	No.
C	cF8	Fd-3m	227

*Standardized

Russ. J. Inorg. Chem.,1979,24,,3-6,Uspenskaya S.I., Kolchemanov N.A., Eliseev A.A., Krynkina S.V.

Preparation

Synthesis No data.

Starting materials No data.

[Crystal Structure](#) [X-ray Diffraction](#) [Properties](#)

Crystal Structure (Published)

[Crystallographic data](#)

すると上のようなデータがでてくる

ダイヤモンドの結晶構造(3)

▼ **Crystal Structure (Standardized)**

Crystallographic data

Cell parameters $a = 0.35668 \text{ nm}$, $b = 0.35668 \text{ nm}$, $c = 0.35668 \text{ nm}$,
 $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 90^\circ$

Cell volume 0.0454 nm^3

Cell density (calculated) 3.52 Mg m^{-3}

Z 8

Atom coordinates

No	Site notation	Atom	Multiplicity	Wyckoff	Site symmetry	x	y	z	Occupancy
1	C	C	8	a	-43m	1/8	1/8	1/8	1.0

Transition from Published Data to Standardized Data
Transition : origin shift 1/8 1/8 1/8

[Download crystal structure data\(CIF\)](#)

a-axis direction b-axis direction

c-axis direction diagonal direction

[Control with mouse](#)

Back

Copyright(C) NIMS. All rights reserved.

一番下に結晶構造データがある

このボタンを押すとcifファイルがダウンロードされる

初回はポップアップの注意がでる
 注意の右側の「Preferences」を押し
 「Allow pop-ups」を選択し、
 再度(CIF)のボタンを押す

cifファイルとは？

- Crystallographic Information File
- ユニットセル・対称性・原子位置などの情報を含む
- VESTAを始めとして多くのソフトで可視化することができる

ダイヤモンドの結晶構造(4)

画像から5文字入力+規約確認チェック+「download」ボタンを押す
 →「Save」を選択→ダウンロードが始まる

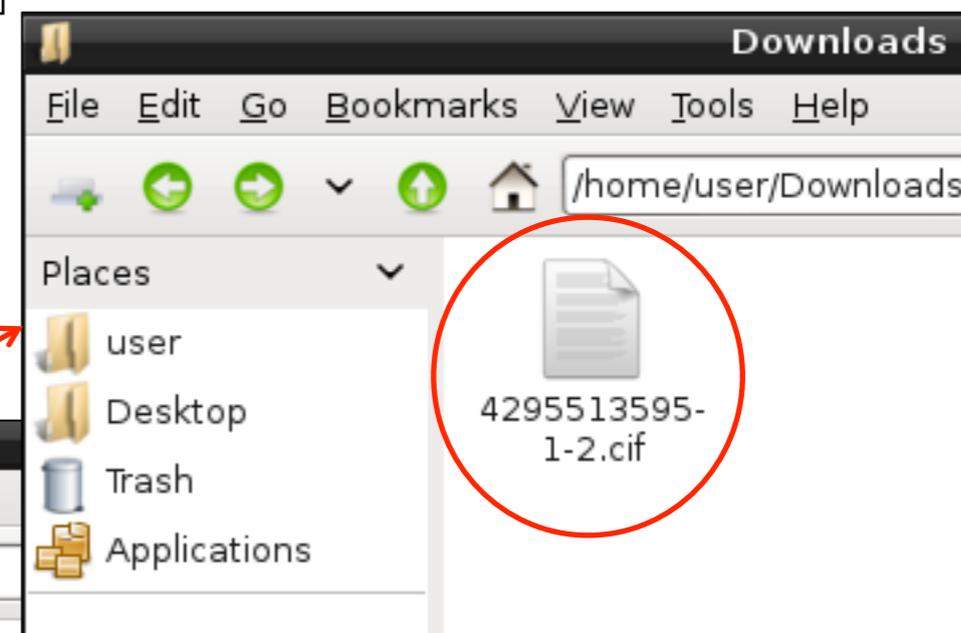
ちゃんとダウンロードされたか確認しよう



↓ ファイルマネージャーを起動



ダブルクリック



名前をCdia.cifに変えておく
 ファイル選択→「Edit」
 →「Rename」

ファイルの変換

• スタートメニュー → 「MateriApps」 → 「C-Tools」 → 起動画面がでてくる

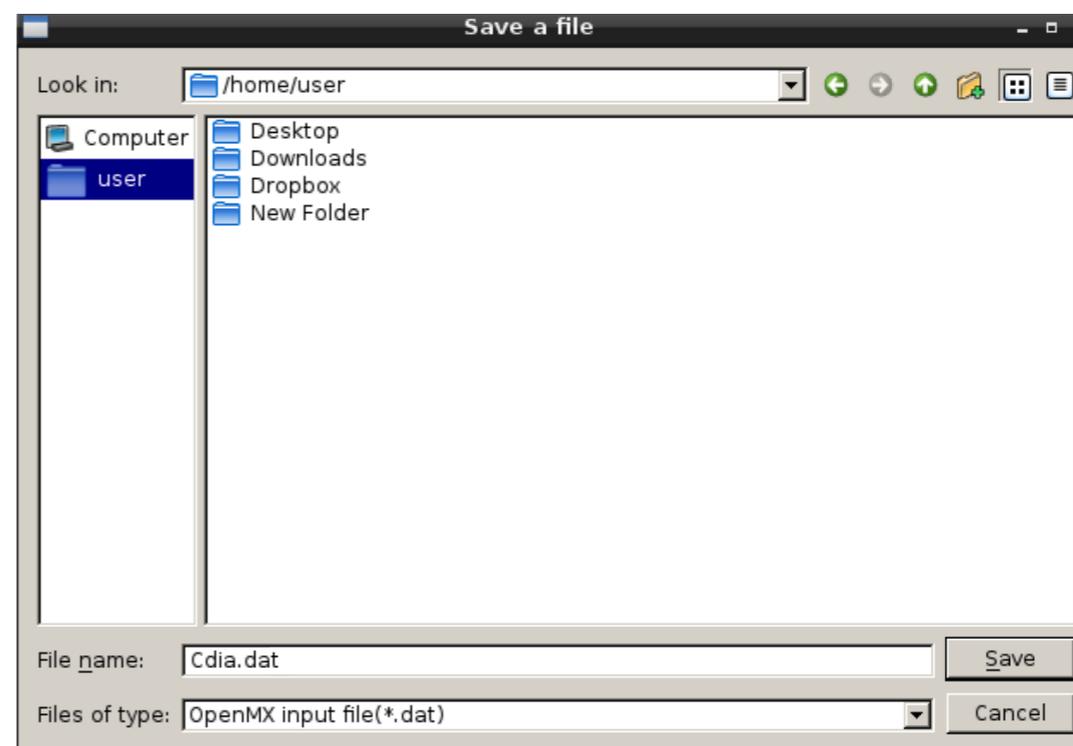
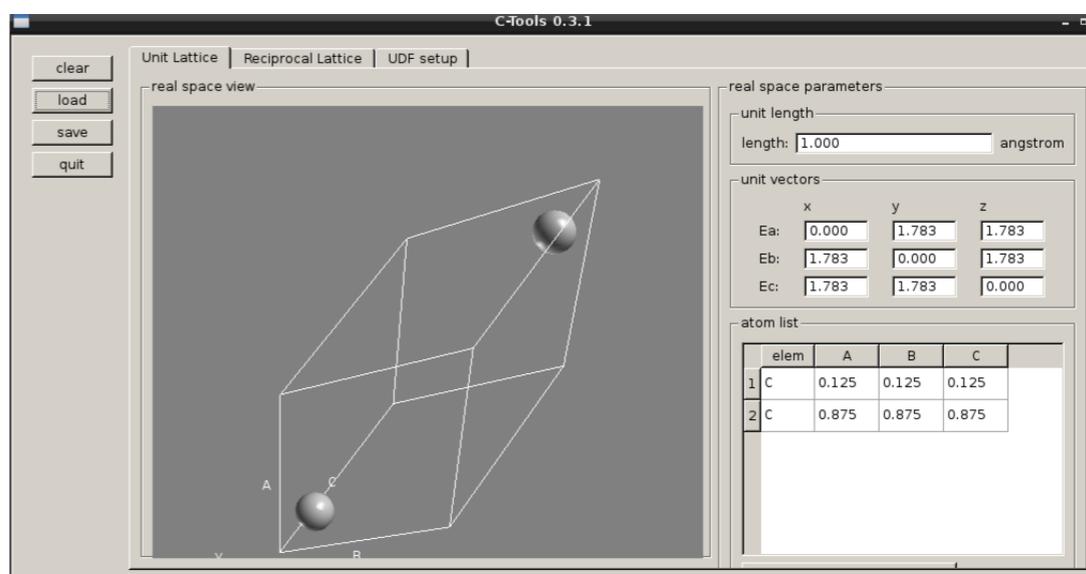
• 「load」 → ファイルのタイプを Crystal structure file (*.cif) にする

• 「Downloads」フォルダ中にある さきほどダウンロードしたファイル (名前変えていればCdia.cif) を選択

• 上図のような画面ができれば成功 マウスでグリグリできます

• 「save」 → ファイルのタイプを OpenMX input file (*.dat) にする

• 上のLook in: のよこの欄をクリックし 「/home/user」 を選択 (ホームにする) ファイル名を 「Cdia.dat」 をしてセーブ (下図)

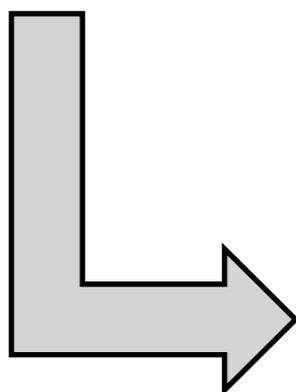


OpenMXの実行

- スタートメニュー → 「Accessories」 → 「LXTerminal」
- 「openmx Cdia.dat」とうち、リターン（上図）
- 計算がはじまる（2分程度） → 正常に終了すれば下図のようになる

```

user@debian: ~
File Edit Tabs Help
user@debian:~$ openmx Cdia.dat
  
```



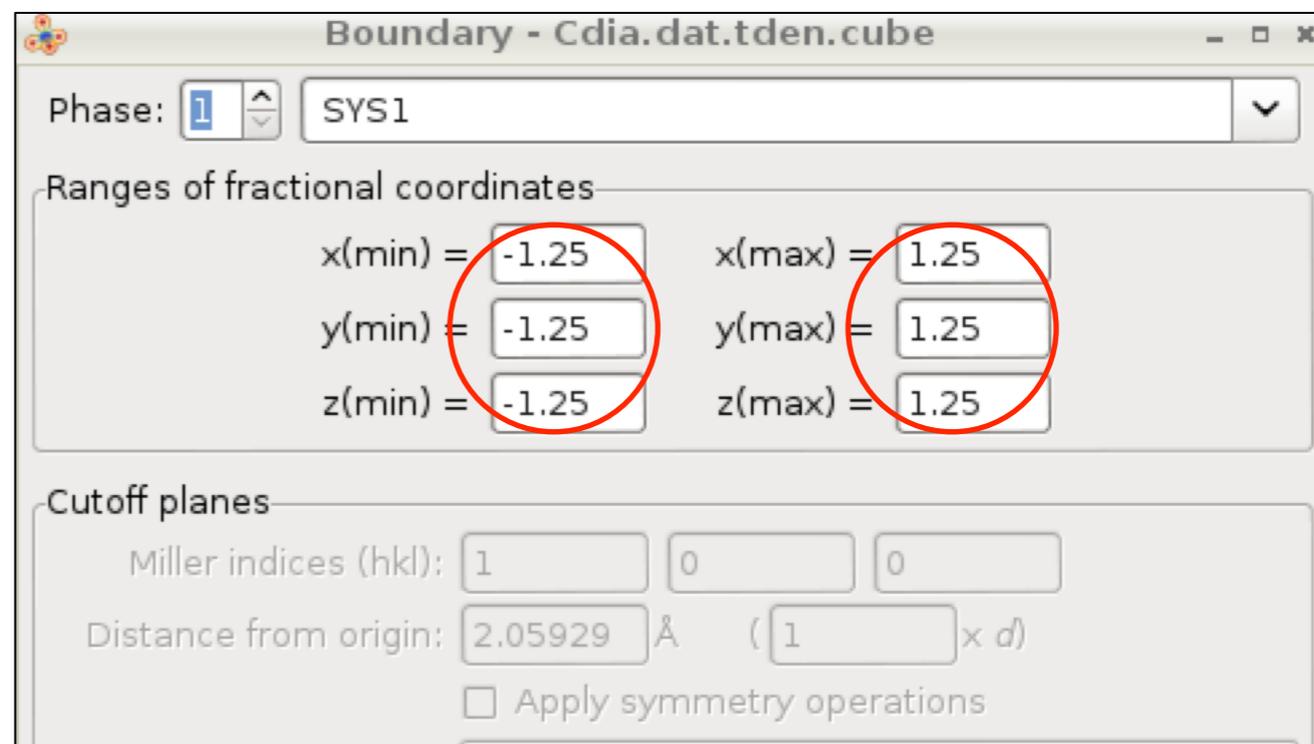
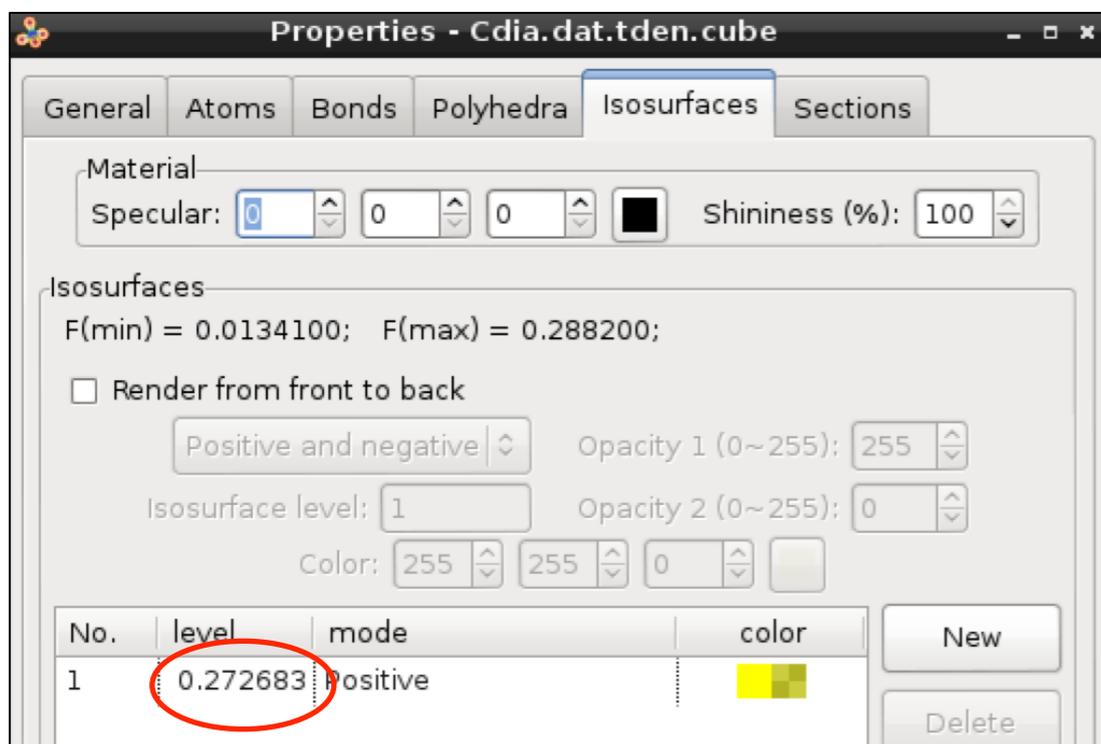
```

user@debian: ~
File Edit Tabs Help
  OutData          = 0      0.063      0      0.063
  DFT               = 0      123.883   0      123.883
*** In DFT ***
  Set_OLP_Kin       = 0      5.498     0      5.498
  Set_NonLocal      = 0      8.784     0      8.784
  Set_ProExpn_VNA   = 0      17.402    0      17.402
  Set_Hamiltonian   = 0      7.511     0      7.511
  Poisson           = 0      0.071     0      0.071
  Diagonalization   = 0      15.089    0      15.089
  Mixing_DM         = 0      0.006     0      0.006
  Force             = 0      61.252    0      61.252
  Total_Energy      = 0      3.999     0      3.999
  Set_Aden_Grid     = 0      0.017     0      0.017
  Set_Orbitals_Grid = 0      0.031     0      0.031
  Set_Density_Grid  = 0      4.181     0      4.181
  RestartFileDFT    = 0      0.000     0      0.000
  Mulliken_Charge   = 0      0.007     0      0.007
  FFT(2D)_Density   = 0      0.000     0      0.000
  Others            = 0      0.036     0      0.036

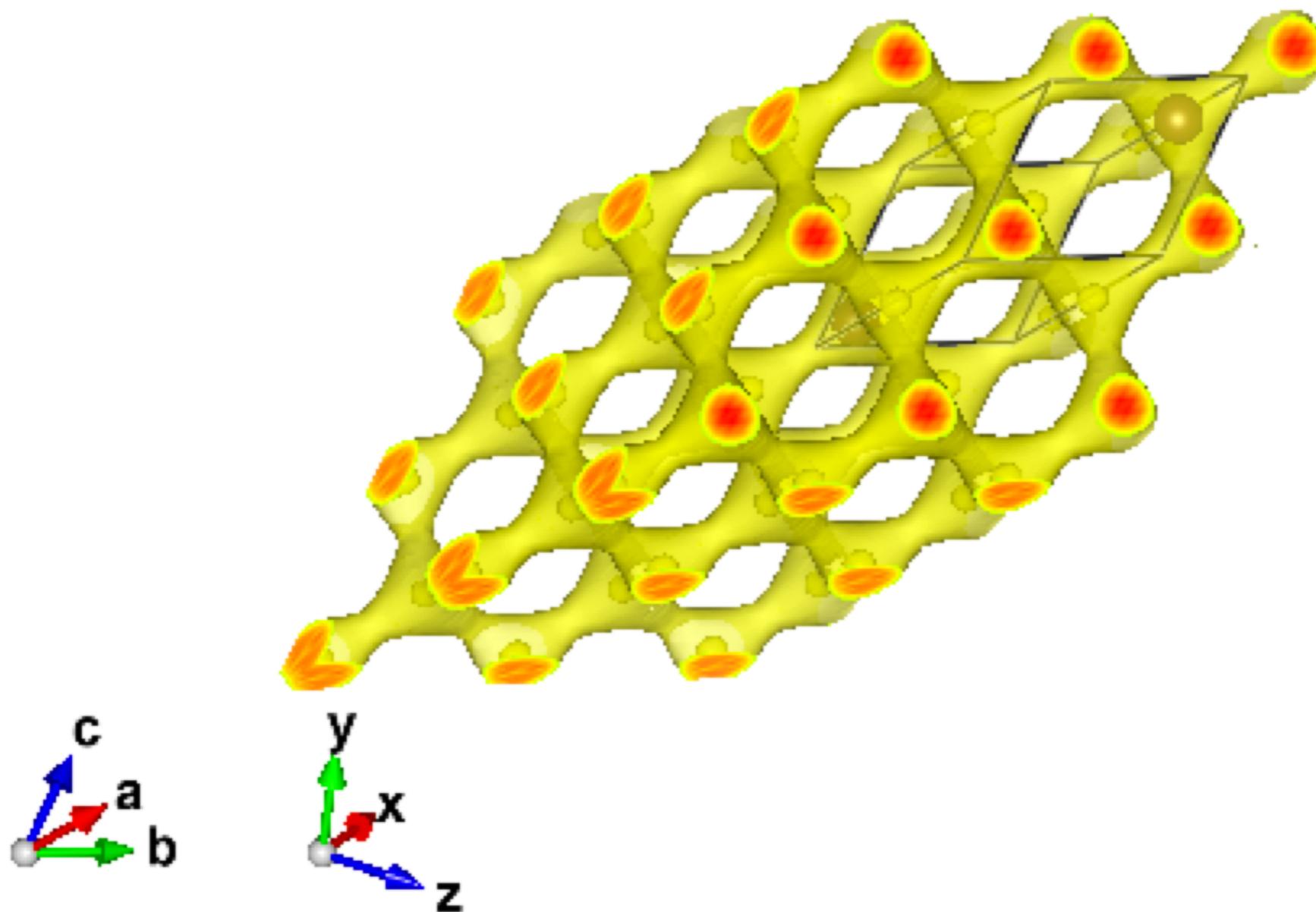
The calculation was normally finished.
user@debian:~$
  
```

計算結果をみてみよう

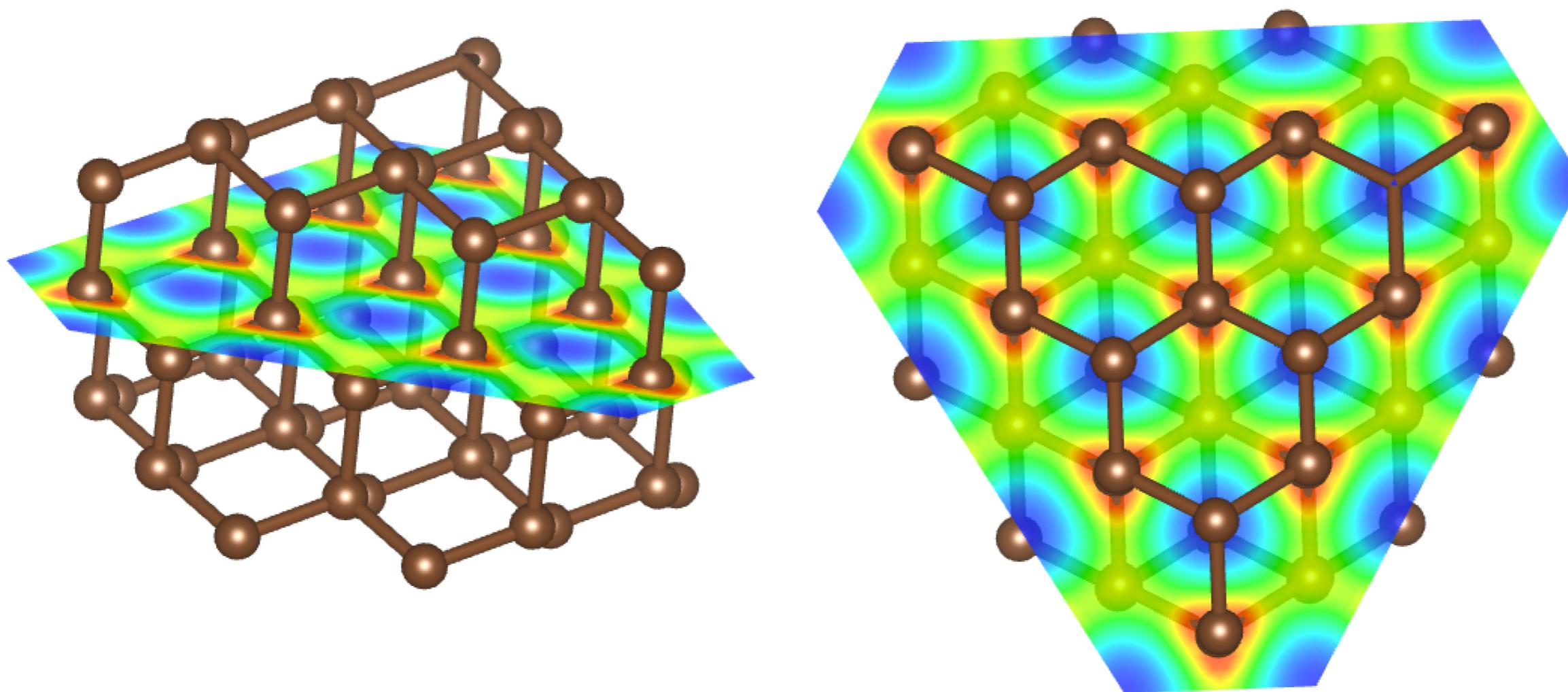
- スタートメニュー → 「Education」 → 「VESTA」 (可視化ソフト)
- VESTAのなかで「file」 → 「Open」 → 「Cdia.dat.tden.cube」を選択
→ 「Open」 ボタンを押す → なにか表示されたら成功
- 更に「Object」 → 「Properties」 → 「Isosurface...」を選択
左図のようなボックスがでる。図の赤丸の部分をクリックし、0.1に変更 OK押す
- 更に「Object」 → 「Boundary」を選択
右図のようにx,y,zの(min)をぜんぶ-1.25に、maxをぜんぶ1.25に変更 OK押す



このようなグラフができる（マウスで動かせる）



さらに頑張ればこんな図に仕上げることにもできる



電子密度の計算例をもうひとつ

有名な誘電体（バンド絶縁体）である PbTiO_3 をみてみよう

AtomWork

Home > Search materials > List of substances

Search materials - List of found substances

Results 1-3 of 3 for Chemical system: Pb Ti O

Find materials that have ...

No.	Chemical formula	Substance name	Number of elements	Phase identifier			
				Structure type (Prototype)	Pearson symbol	Space group	Space group number
1	Ti3PbO7		3	Ti3PbO7	mP22	P21/m	11
2	TiPbO3		3	BaTiO3	tP5	P4mm	99
3	TiPbO3		3	CaTiO3	cP5	Pm-3m	221

Back

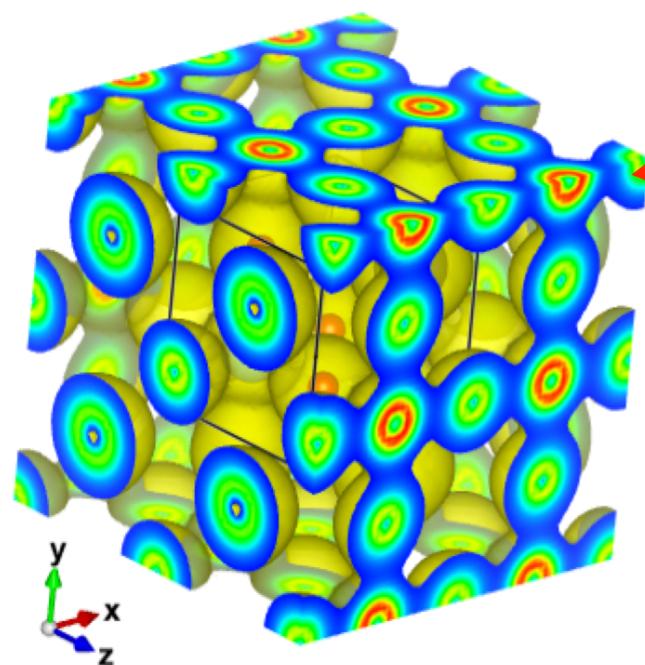
Copyright(C) NIMS. All rights reserved.

高温相（常誘電）

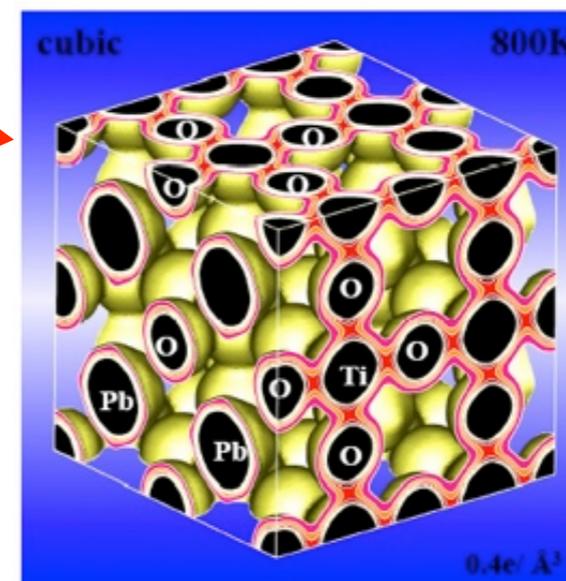
低温相（強誘電）

結果だけ見せます

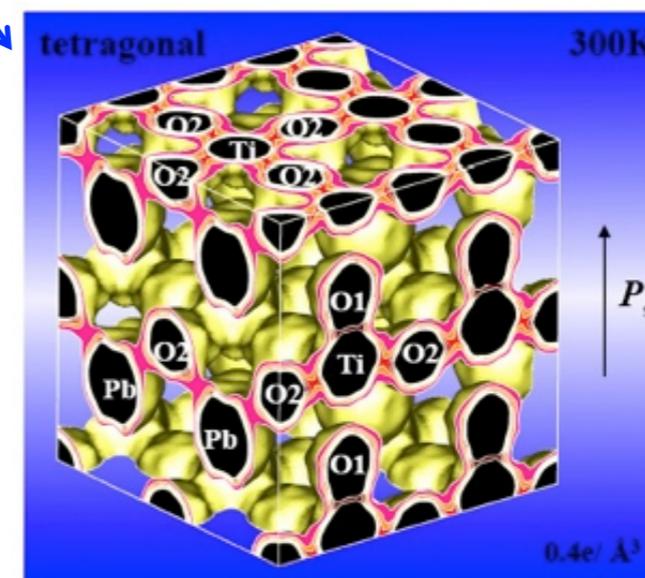
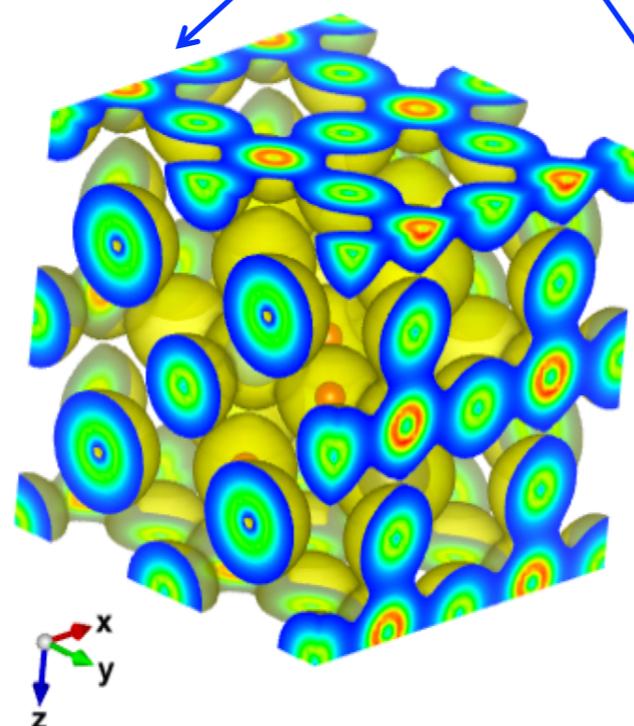
Spring-8による実験



高温相



低温相



よく見ると擬ポテンシャル法であることが分かる

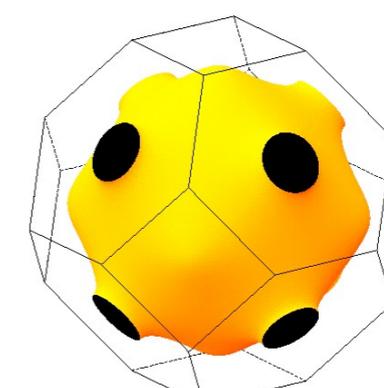
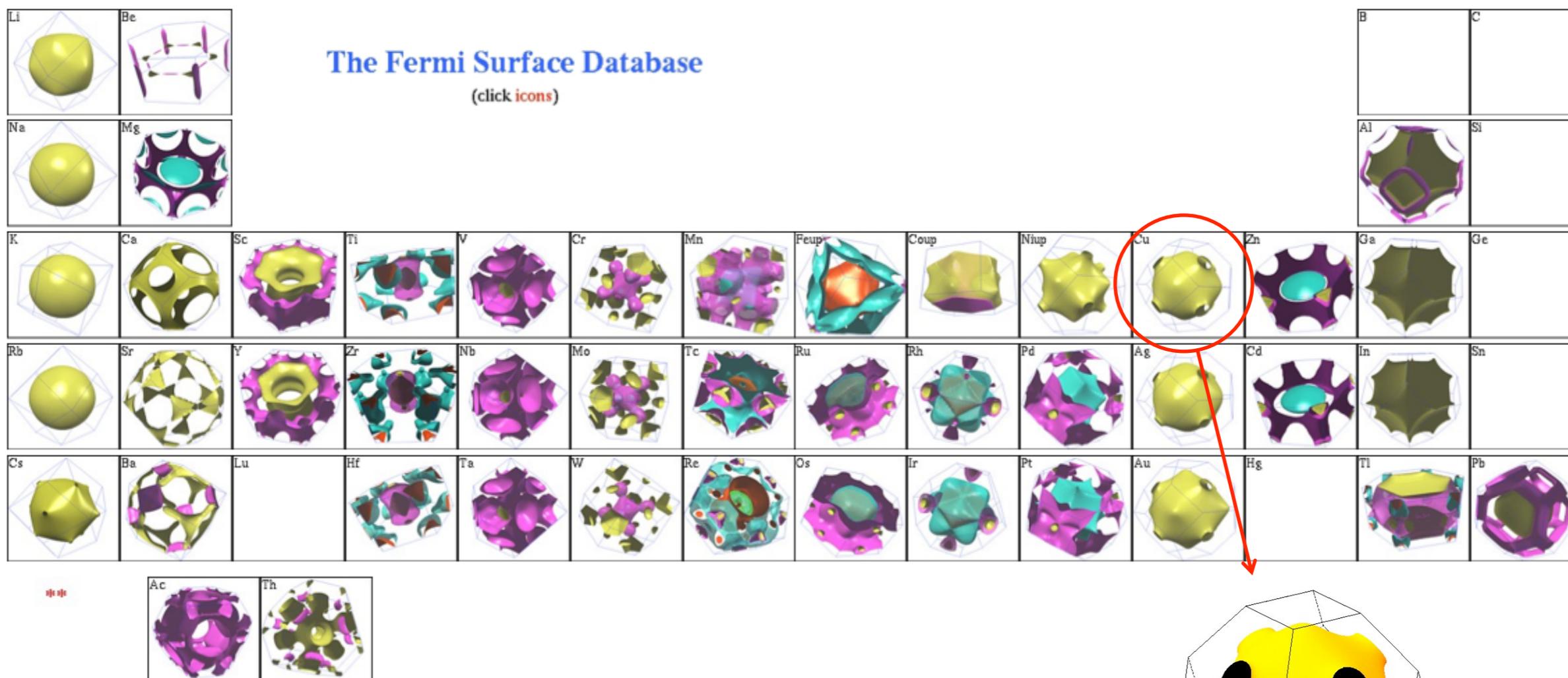
MacBookPro late-2012, 2.9GHz Core i7

高温相：22分 低温相：50分

<http://www.spring8.or.jp/wkg/BL02B2/solution/lang/SOL-0000001270>

物性理論屋としてはフェルミ面もみたい

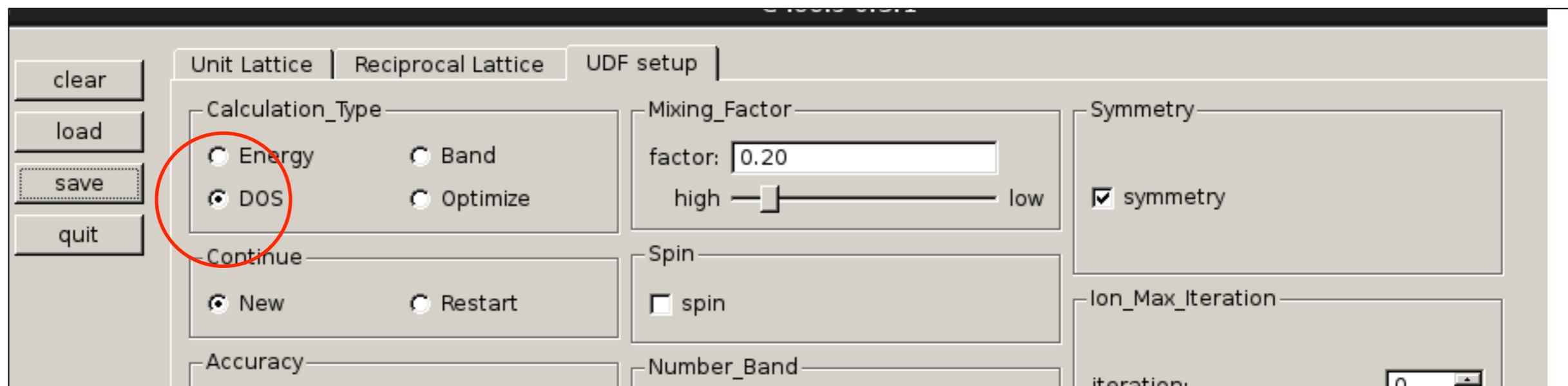
<http://www.phys.ufl.edu/fermisurface/>



フェルミ面は金属物性の基本

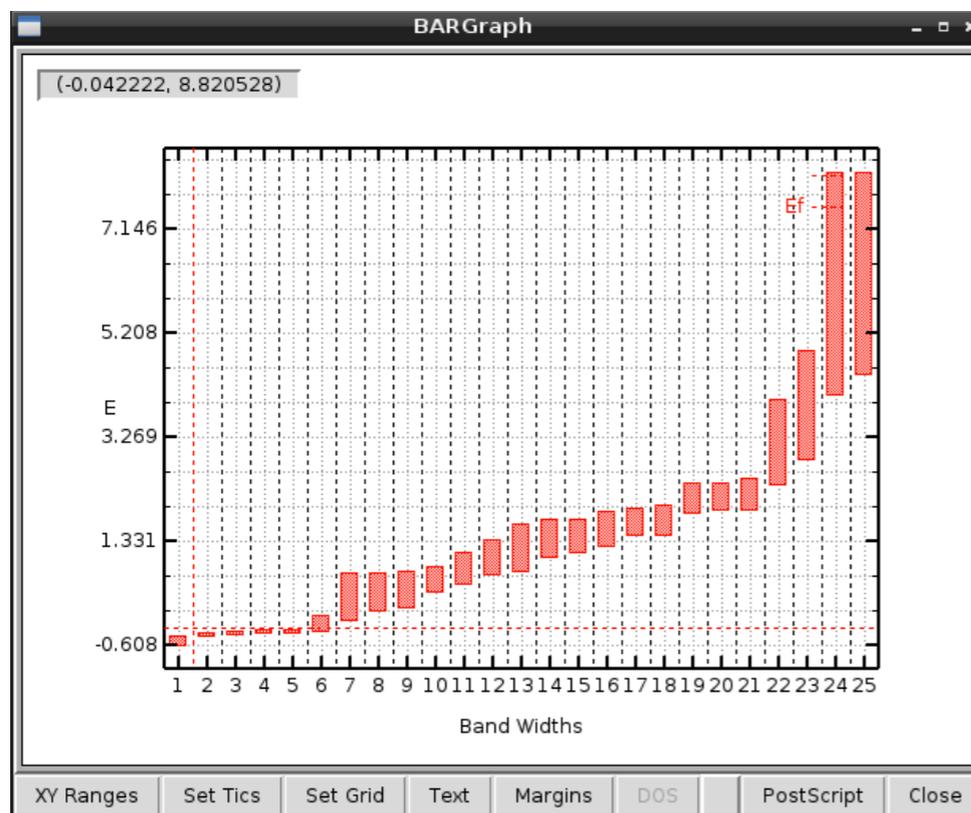
Cuの電子状態計算（おさらいも兼ねて）

- 結晶構造ファイル(cifファイル)を取ってくる
- C-Toolsで変換をする。このとき図のようにUDF setupタブの「Calculation_Type」オプションを「DOS」にする
セーブするファイル名はなんでもいいが、ここでは「Cu.dat」とする
- OpenMXで実行（Lxterminalでopenmx Cu.datをうって実行，8分程度かかる）
- スタートメニュー→「Education」→「XCrysDen」
- XCrysDenが起動するので、そこで「file」→「Open Structure ...」
→「Open BXSf (i.e. Fermi Surface Files)」→「Cu.dat.FermiSurf0.bxsf」を選択

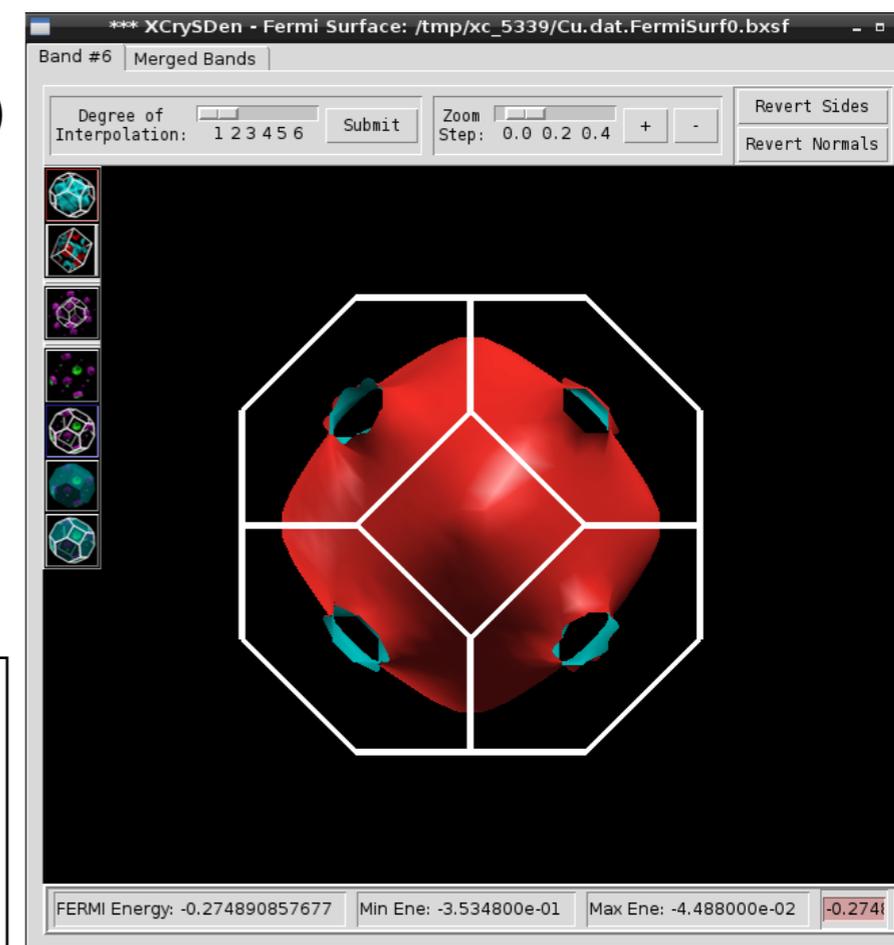


フェルミ面の出力

- フェルミエネルギー入力のある画面があるが、デフォルトの値のままOKを押す
- 新たに3つのウィンドウが開く。そのうち「BARGraphウィンドウ」はエネルギーの低いバンドからバンド許容帯が示してある。今の場合、6番目のバンドのみ、赤い水平な点線で示しているフェルミエネルギーと交差している（左図）
- よって「Select bandsウィンドウ」で「Band number: 6」を選択（全部選択して、あとから選ぶことも可能）
- 新たなウィンドウにフェルミ面が表示される（右図）



マウスで
グリグリ
回せます



もっと精度よく計算するためには

C-Tools 0.3.1

Unit Lattice | Reciprocal Lattice | UDF setup

clear
load
save
quit

Calculation_Type
 Energy Band
 DOS Optimize

Mixing_Factor
 factor: 0.10
 high low

Symmetry
 symmetry

Continue
 New Rest

Spin

Accuracy
 Low Normal High

Number_Band
 band: 7

Ion_Max_Iteration
 iteration: 0

Cutoff_Wave_Function
 cutoff: 81.00 Ry
 low high

Smearing
 Recommend
 Methfessel-Paxton
 Fermi

Force_Converge
 threshold: 1.00e-03
 high low

Energy_Converge
 threshold: 1.00e-12 a.u.
 high low

XC_Type
 LDA PBE
 PBEsol PW91
 PBE0 HF

Electron_Max_Iteration
 iteration: 60

Sampling_k_point
 Sparse Normal Dense

精度を上げる

k点の数を増やす

MateriAppsとはなにか？

物質科学シミュレーションのポータルサイト

- 物質科学に関連する多くの計算アプリを紹介
- 現在**151**のアプリを掲載
- タグによる検索機能
- フォーラムを開設可
- 事例紹介記事の掲載
- 講習会情報の掲載

2013年5月に開設
 平均月間5000PV
 平均月間1100ユーザ

「MateriApps」で検索

MateriApps掲載アプリケーション

151の物質科学アプリケーションやツールを紹介 (2015年7月現在)

密度汎関数法

AkaiKKR☆

OpenMX☆

xTAPP☆

ABINIT☆

...

(37)

量子化学

FMO☆

SMASH☆

GAMESS☆

DC☆

...

(19)

分子動力学

MODYLAS☆

Gromacs☆

ERmod☆

MDACP

...

(16)

格子模型

ALPS☆

DSQSS

BLOCK

DMRG++

...

(21)

連続体シミュレーション

ANSYS Multiphysics

Octa ...

(8)

データ解析

CLUPAN☆

phonopy☆ (25)

可視化

fu☆

TAPIOCA☆ (28)

☆ MateriApps LIVE! 収録 (一部予定) アプリ

MateriApps活動の目的

• 開発者側の問題点

- 有益なプログラムはもっと使われるべきだが、多くのソフトは研究室内にとどまって終わる
- 公開・情報発信には手間がかかる
- アプリ開発を成果として主張しにくい(指標がない)



両者をつなぐ役割を果たしたい

• 利用者側の問題点

- どんなプログラムがあるのかよくわからない
- インストール・使い方について知りたい
- 開発者の活動(特に講習会情報)をもっと知りたい

アプリケーション普及の3本柱

- アプリの情報発信
—ポータルサイト MateriApps
- スパコン上でのアプリ利用の支援
—「京」や汎用スパコンへのアプリのプレインストール
- **個人・研究室レベルでのアプリ利用の支援**
—MateriApps LIVE! (本講演のメイン)

教育活動の重要性

- 地味ではあるが教育活動が重要
 - とにかくユーザを増やすことが重要（アプリ普及のためにも、スパコンの応用利用の観点からも）
 - アプリケーション普及の鍵となるのが授業や研究室での利用
 - 大学教員としても、学部生・大学院生にアプリを利用した数値計算のスキルを伝授して社会にでていてもらいたい
 - 単にアプリを「ブラックボックス」とせず、中でどのような計算が行われているかをしっかりと教えるべき（大学が重要な役割）
- 実際にデモを準備してつくづく感じたこと
 - 開発者はもっと利用者のことを考えるべきだ（使って欲しいなら）

MateriApps Live!の利点と欠点

• 利点

• 下記の手間を解消できる

- インストールの壁：インストールの手間（しばしば困難）
- 実行までの壁：入力ファイル準備の手間（しばしば困難）

• 特に教育活動への利用が期待できる

• 欠点

• 実行速度が遅い

- まだ入力ファイル準備・結果の解析・可視化の簡易化に多くの課題を含む（開発者へのフィードバックが必要）

MateriApps クレジット

- 運営:

計算物質科学イニシアティブ (CMSI)、東京大学物性研究所 (ISSP)、自然科学研究機構分子科学研究所 (IMS)、東北大学金属材料研究所 (IMR)、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)広報小委員会

- MateriApps 開発チーム

藤堂真治 (東大理/ISSP)、五十嵐亮 (CMSI-ISSP)、吉澤香奈子 (CMSI-東大理)、加藤岳生 (ISSP)、川島直輝 (ISSP)、小西優祐 (CMSI-産総研)、笠松秀輔 (ISSP)、野田真史 (CMSI-IMS)、河津 励 (CMSI-横国大)、寺田弥生 (CMSI-IMR)、(委託) 吉見一慶、佐々木翔一、土田成宏

- 協力:

CMSI元素戦略拠点、東京大学物性研究所 計算物質科学研究センター、自然科学研究機構 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点、東北大学金属材料研究所 計算材料科学研究拠点