

# 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

Ver. 4.4  
2024年6月リリース!

**Advance/PHASE** は、密度汎関数理論と擬ポテンシャルを用いた平面波展開による国産の第一原理計算ソフトウェアです。

1993年から複数の国プロによる開発を経て2004年にアドバンスソフト株式会社から商用版をリリースし、その後も現在まで30年以上の開発により進化し続けています。金属、半導体、触媒等の材料分野の研究開発を中心に多くの企業、研究機関、教育機関にご利用いただいております。

周期表全ての元素の擬ポテンシャルを揃えているため、金属・絶縁体・半導体・磁性体・誘電体・ハーフメタル・有機材料・有機半導体など様々な材料の結晶などの3次元系だけでなく、表面・界面や分子の孤立系のシミュレーションができます。

## ソルバーの機能追加

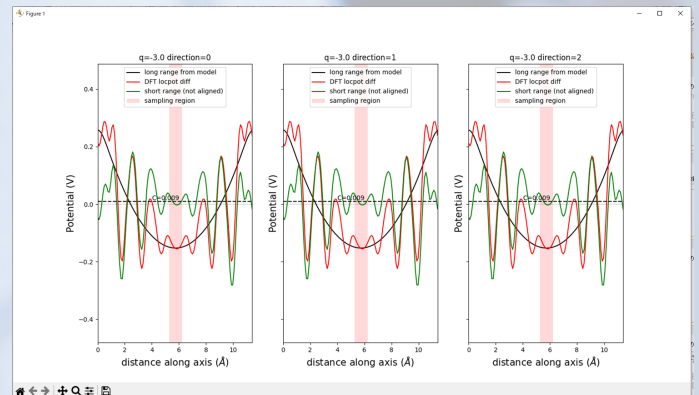
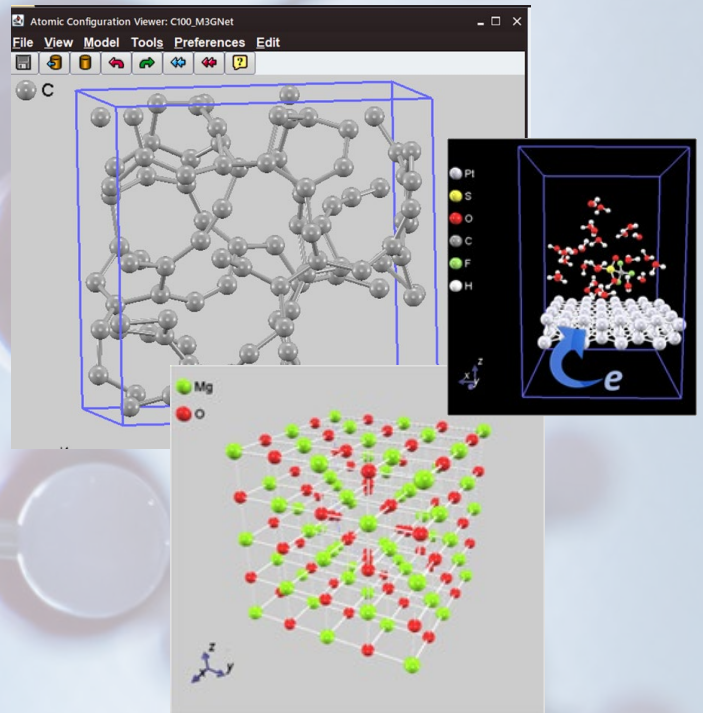
NVT-MDの機能拡張	熱浴の緩和時間設定・ 温度域の制御・ランジュバン熱浴の導入
NEB計算の最適化アルゴリズムの追加	BFGS 法・CG 法の導入
帯電状態における点欠陥形成エネルギー補正項の計算機能の追加	FNV 法・extended FNV 法

## GUI機能の強化

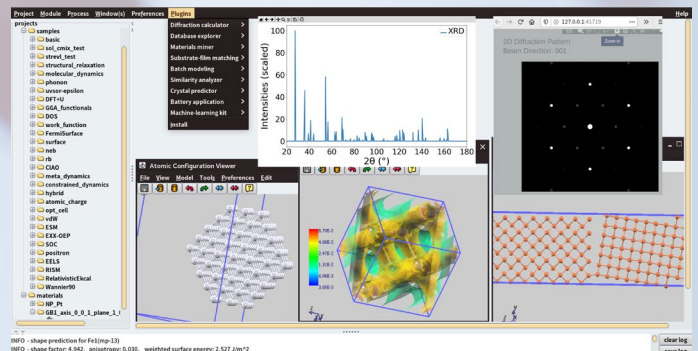
- MI機能の強化
- ワークフロー機能の増強
- Neural Network Potentials作成用の教師データ作成機能 (n2p2/aenet向け)

## 第三者ソフトウェアとの連携

ALAMODE	格子振動の非調和性と格子熱伝導率の解析
ASE	python環境でのPHASE実行
PACKMOL	クラスター結晶やアモルファス構造などの作成



FNV法による補正項の計算結果



使いやすいGUIから自動生成・計算実行  
結果取得・結果解析・第3者ソフトとの連携



## 商用版 PHASEならではの魅力

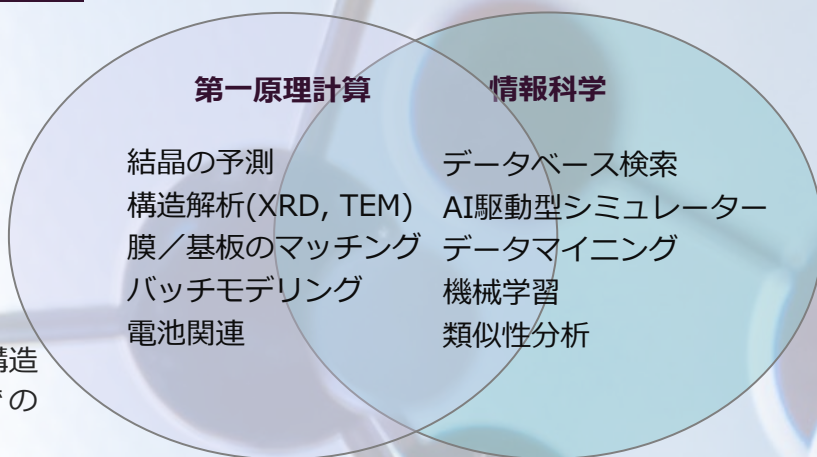
### ◆充実のサポートサービス

- ・開発チームによるE-mailサポート
- ・習熟度にあわせてトレーニングコース  
(別途有償)

### ◆使いやすい専用GUI PHASE Viewer付属

### ◆Advance/PHASEのMI機能

データの取得だけでなく解析、可視化、構造から計算プロジェクトの一括作成までのモジュールを装備



## 機能一覧

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 (Bader電荷解析など)、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、EELS(電子エネルギー損失分光) /XAFS (X線吸収微細構造)
格子振動解析	振動モード、フォノン状態密度、フォノンバンド、熱力学解析 (比熱・自由エネルギーなど)
分子動力学	NVEおよびNVT
反応経路探索	Nudged Elastic Band法、メタ・ダイナミクス法、拘束条件付きダイナミクス
雰囲気制御	Effective Screening Medium法、Constant- $\mu$ 法、3D-RISM-SCF法
Post SCF解析	ストレス・テンソル、仕事関数、圧電定数、STM・AFM像
解析支援	付属GUIによる入力ファイル作成および計算結果の可視化、MI機能
関連プログラム連携	<b>BoltzTraP</b> , <b>BoltzTraP2</b> (輸送特性・熱電の解析)、 <b>Wannier90</b> (強相関電子系の解析)、 <b>Bader</b> (電荷解析)、 <b>ATAT</b> (固溶体や合金のSQS作成)、 <b>asetk</b> (電流一定モードのSTMシミュレーション)、 <b>M3GNet</b> (結晶・合金などの構造最適化の加速、MD計算)、 <b>Open Catalyst Project</b> (金属表面での分子吸着系の構造最適化の加速)

## 動作環境

Windows版	単一の計算機でご利用ください。64bit OS 8.1、10、11
Linux版	PCクラスターを利用した並列計算をご利用いただけます。 (ノード間接続はギガビットイーサネット) Red Hat Enterprise Linux 7以上 (AMD64, Intel 64のみ)、 またはその互換ディストリビューション。
Mac版	GUIのみ (10.12以降)

