

(5) ポスター発表

物質科学シミュレーションのポータル MateriApps

P48

MateriApps – Portal of Materials Science Simulation

藤堂眞治 wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp

東京大学大学院理学系研究科/物性研究所、物質・材料研究機構

計算物質科学の分野では、多くの有償・無償ソフトウェアが開発・公開されており、ユーザーは目的に応じてこれらのソフトウェアを利用することができる。ソフトウェアを探す際には、Googleなどで検索を行うことが多いであろうが、膨大な検索結果のなかから自分の目的にあったソフトウェアを探すことは、骨の折れる作業である。さらにソフトウェアのインストール作業の煩雑さが、初心者にとって最初の障壁となることも多い。

MateriApps はソフトウェア情報を効率よくユーザーに提供することを目的とした、物質科学計算ソフトウェアのためのポータルサイトである。MateriApps では、国内外で開発された260以上の物質科学アプリやツールについて、その概要や特徴を掲載することで、ソフトウェア開発者の広報活動を支援するだけでなく、実験家や企業研究者、学生が計算物質科学ソフトウェアを使い始める上で有益な情報を発信してきた。MateriApps は2013年に開設され、現在では毎月平均して15,000程度のページビューをもつ、世界的に見てもよく利用されるポータルサイトとなっている。MateriApps では、ユーザーが新たにソフトウェアを使う最初の一步の敷居をできるだけ下げることが目標の一つとなっており、強力な検索機能が特徴となっている。また、2018年のリニューアルでは、ユーザーがアプリを選ぶための参考情報をより充実させるために、新コンテンツである「レビュー」と「アプリコンシェルジュ」が追加された。「レビュー」では、アプリのインストール方法や簡単な利用法が掲載されている。また、「アプリコンシェルジュ」では、ユーザーから頂いた計算物質科学やアプリに関する質問・要望と MateriApps 開発チームによる回答や、計算手法に関するキーワード・関連アプリの説明などが掲載されている。また関連した活動として、統合環境 MateriApps LIVE!の開発を行っており、主要なソフトウェアを面倒なインストール作業なしに試用できる環境を提供している。現在、MateriApps は東京大学物性研究所が運営を行っているが、2019年にはソフトウェアの普及・広報活動が評価され、「文部科学大臣表彰(科学技術振興部門)」を受賞した。本発表では、MateriApps の概要とアプリの検索方法の詳細、レビューやキーワード解説などのコンテンツを紹介する。また、MateriApps LIVE!による強相関系の解析例などについてもデモンストレーションを交えつつ紹介したい。



図 MateriApps のトップページ

【共著者(所属)】

井戸康太(東大物性研)・笠松秀輔(山形大)、加藤岳生(東大物性研)、川島直輝(東大物性研)、三澤貴宏(東大物性研)、吉澤香奈子(RIST)(MateriApps 開発チーム)

【関連プロジェクト】

ポスト「京」プロジェクト重点課題 7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成
計算物質科学人材育成コンソーシアム
TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」

【参考文献】

- [1] Y. Konishi, R. Igarashi, S. Kasamatsu, T. Kato, N. Kawashima, T. Kawatsu, H. Kouta, M. Noda, S. Sasaki, Y. Terada, S. Todo, S. Tsuchida, K. Yoshimi, K. Yoshizawa., JPS Conf. Proc. 5, 011007 (2015).
- [2] 本山裕一, 三澤貴宏, 加藤岳生, 藤堂眞治, 固体物理 52, 743 (2017).
- [3] 井戸康太, 加藤岳生, 三澤貴宏, 藤堂眞治, アンサンブル (2020) (掲載予定)

【関連 WEB】

- [1] <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp>
- [2] <https://cmsi.github.io/MateriAppsLive>