

のチュートリアルを始めるのに必要な環境は全て 1 本の USB メモリに収められています。この USB メモリは、MateriApps LIVE! の Web サイトからファイルをダウンロードし、自ら作成することもできますが、CMSI 神戸拠点および物性研などで定期的に開催している CMSI 主催のソフトウェア講習会などで教材として利用し、USB メモリの配布もしています。2014 年 6 月現在のバージョン 1.2 では、次のソフトウェアが利用可能です。

- CMSI の公開アプリ
 - AkaiKKR(旧 Machikaneyama2002), ALPS, ERmod, Feram, OpenMX, xTAPP
- 公開アプリ
 - ABINIT, CP2K, GAMESS(セットアップツール), Gromacs, Quantum Espresso
- 可視化ツール
 - gnuplot, OpenDX, Paraview, Pymol, Tapioca
- 開発ツール
 - Emacs, gcc, g++, gfortran, perl, python, ruby, vim 等

MateriApps LIVE! には密度汎関数法(DFT)のアプリケーションだけでも複数含まれていることから、気軽に比較することができるため、問題に適するアプリケーションを簡単に選定できます。また、可視化ツールも含まれていることから、シミュレーション結果をすぐに視覚的に確認することで、結果の直感的な理解にも役立ちます。

MateriApps LIVE! の起動に成功すると、まずは図 2 のような画面になります。

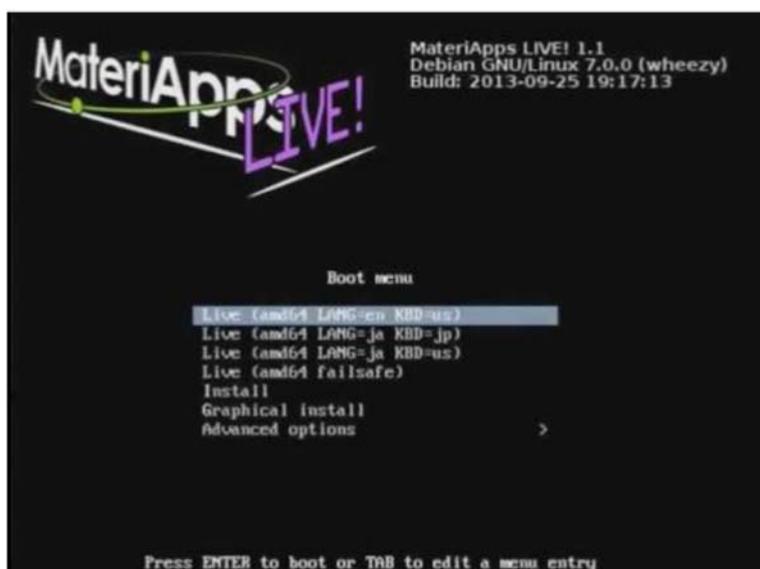


図 2 MateriApps LIVE! の起動画面

その後、言語やキーボードの選択をして起動後すると、図 3 のような Linux のデスクトップ画面となります。なお、MateriApps LIVE! 起動する際は、図 2 において、“Install”を選ばないでください。ご使用中の OS を上書きしてしまう可能性があります。起動後は、入力ファイルを準備することで、AkaiKKR³、OpenMX⁴や xTAPP⁵のような密度汎関数法(DFT)の計算ができるソフトウェアや、ALPS⁶のような量子格子模型のシミュレーションができます。入力ファイルの作成方法など、それぞれのアプリケーションのチュートリアルは、ポータルサイト MateriApps、またはオフィシャルサイトのドキュメントを参照してください。

³ <http://kkr.phys.sci.osaka-u.ac.jp/>

⁴ <http://www.openmx-square.org/>

⁵ <http://frodo.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/xtapp/index.html>

⁶ <http://alps.comp-phys.org/>



図 3 MateriApps LIVE! のデスクトップ

MateriApps LIVE! の改善には、利用者の声が重要です。MateriApps LIVE! で利用したいアプリケーションなどありましたら、MateriApps 開発チームへぜひフィードバックをお寄せください。今後、利用方法等、ドキュメントの拡充も行っていきます。