九州大学情報基盤研究開発センター
民間利用成果報告書

提出日：2020 年　6　月　16　日

利用課題名		第一原理分子動力学法を用いたガラス材料の検討				
課題責任者	企業名	AGC 株式会社　印				
	フリガナ 氏名	今村　穣　（今村）	部署名	先端技術研究所	職位	マネジャー
	連絡先	住　所：〒221-0863 神奈川県横浜市神奈川区羽沢町 1150 E-mail：yutaka.imamura@agc.com		TEL　050-9014-1437 FAX		
利用期間		2019 年 4 月 1 日 ～ 2019 年 12 月 31 日				
利用成果公開延期希望の有無		☑ 即時公開　・　☐ 公開延期（成果公開予定：　　年　　月）				

※利用成果報告書は原則公開ですが、課題終了後最大２年間公開を延期することが可能です。

- 本様式の変更はできません。
- 補足資料を付加することは可能です。

受付番号	11	受付日 20 年 7月 17 日	受付印	情報基盤研究開発センター長 九州大学 20.7.17 承認

■利用計画全体の概略（申込書と同じ内容を記述してください）

1） 利用目的

第一原理分子動力学法を用いてガラス材料の幾何学的構造・物性に関して検討を行う。

2） 利用意義

これまでガラスのシミュレーションでは、主に古典分子動力学法を用いられてきた。古典分子動力学法によるガラス材料の検討には適切に記述できるポテンシャルの準備が必要だが、新規材料ではポテンシャルの準備が困難であった。一方、計算ソフトウェアや計算環境の向上などにより、ポテンシャルを必要としない第一原理計算に基づく分子動力学法の計算が可能となってきた。そこで、本研究では、第一原理分子動力学法を用いてガラス材料を計算する。さらに、古典分子動力学計算で得られた幾何学的構造・物性と比較・議論を行う。また、実験値との比較を通して第一原理分子動力学法の問題点も明らかにする。

3） 必要性

古典・第一原理分子動力学法の数値検証を行うことで、古典分子動力学法の適用範囲・第一原理分子動力学法の問題点を明らかにし、計算対象に対して適切な計算手法を選べるようにする。

■成果の概要

1） 本課題で得られた具体的な成果

第一原理計算を用いてガラスなどのアモルファス構造・無機材料の結晶の構造最適化を行った。また、得られた最適化構造をベースとした第一原理分子動力学計算を行い、古典分子動力学法の結果と矛盾しない結果が得られた。一方で、多くの計算が実行予定であったが、計算機が混みあっており予定通り進まなかった。

2） 社会・経済への波及効果の見通し

第一原理分子動力学計算による無機物質組成の検討は有用であることが示唆された。一方で、計算コストの高さから、統計的に意味がある結果を得るのはモデルが小さくない限り現実的でないこともわかった。将来的にそれを突破するアプローチができれば新材料開発の促進につながると考えらのれる。

3） その他

特に無し。

■利用アンケートにご協力ください

1) 利用に関して有益であった事項

同時に複数ジョブが流せてよかった。

2) 利用に関して生じた問題点など

非常に混みあっており計算予定を立てるのが困難であった。

3) ユーザーサポートとして必要と考えられることについて

特に無し

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

計算機の混み具合の緩和

5) 本事業で得られた成果や公表する予定の成果があれば以降に記述をお願いします

特に無し。