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 4 月 20 日

利用課題名		第一原理分子動力学計算によるガラスの構造シミュレーション				
課題責任者	企業名	住友電気工業株式会社				
	フリガナ 氏名	オオツカ　ジュン 大塚　　順	部署名	解析技術研究センター マテリアル CAE グループ	職位	主査
	連絡先	住　所：〒664-0016 兵庫県伊丹市昆陽北 1-1-1 E-mail：ootsuka-jun@sei.co.jp		TEL 072-771-0618 FAX		
利用期間		2019 年 4 月 1 日 ～ 2020 年 3 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	6	受付日 2020 年 6 月 19 日	受付印	情報基盤研究開発センター 九州大学 20.6.19 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

石英系ガラスは建材や光学機器など幅広い分野で利用されており、用途に応じて種々の元素が添加される。必要な機能を発現させるには添加元素の配位構造やSi-Oリング構造の制御が重要であり、これらは溶融あるいは冷却過程での原子の動きに左右される。しかし、非晶質であるため構造を一義的に決めることは困難であり、更に、プロセス温度が数百℃以上に及ぶため実験的な解析にも限界がある。

そこで当社では、第一原理分子動力学(MD)シミュレーションを活用し、高温でのガラス中の原子の挙動に関する研究に取り組んでいる。平成30年度には、九州大学の計算機システムを利用し、第一原理MDで得られたガラス構造について検証した。その結果、ガラス組成やプロセス条件と配位構造などの関係について、高精度の解析ができることを確認した。具体的に、図1は第一原理MD計算から求めたガラス構造モデルから、非架橋酸素数と結合開裂数を抽出したものであり、両者に正の相関関係が示された。また、図2はSi原子の平均二乗変位であり、無添加(SiO_2のみ)に比べCl/Fを添加した方が原子の動きが大きいことが分かった。以上より、原子の動きが大きいほど、結合開裂・非架橋酸素数が多くなることが示された。

本年度は、Si-Oリング構造についても知見を蓄積したく、計算機システムを継続して利用したい。

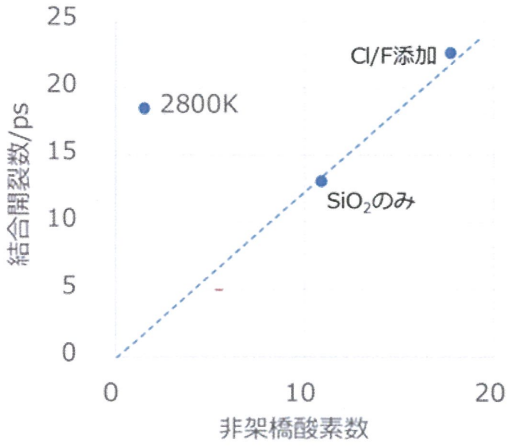

図1. 非架橋酸素と結合開裂

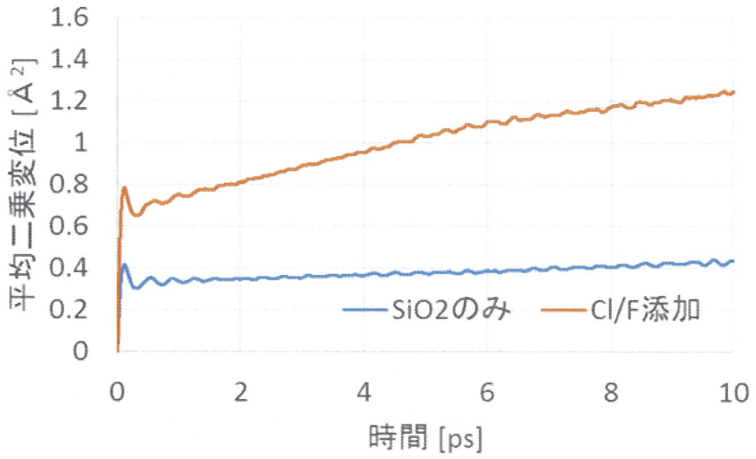

図2. Si原子の平均二乗変位. 温度は2800K.

2） 利用意義

第一原理MDのシミュレーションソフトとして、産業技術総合研究所の土田氏が開発したFEMTECK (Finite Element Method based Total Energy Calculation Kit)を利用する。同ソフトにはオーダーN法が実装されており、これをスパコンと組み合わせることで1,000原子程度の大規模モデルでも現実的な時間で計算できるようになる。

3） 必要性

実際のガラス組成を模擬するには1,000原子規模のモデルが必要であり、第一原理MD計算の実行に要する計算リソースが非常に大きくなる。社内で保有する解析サーバでは計算リソースが不十分なため、スーパーコンピュータを利用したい。

■成果の概要

1) 本課題で得られた具体的な成果

石英ガラスへのCl/F添加による構造変化を理解するため、第一原理MDシミュレーションで作製した構造モデルからSi-Oリング分布を評価した。モデルの規模は約1,000原子で、MD計算における系の設定温度は2,800 Kとし、無添加(SiO_2のみ)とCl/F添加の2種類の組成で、ユニットセル内のプリミティブ・リング[1,2]の数を比較した。

結果は図3に示すように、Cl/F添加によりリング数が減少したことが分かった。これは添加されたCl/FがSi-O結合を開裂させたためと推察される。本検討により、第一原理MDシミュレーションにより求めた石英系ガラスの原子構造に対して添加元素によるSi-Oリング構造の変化を定評評価できることを示した。

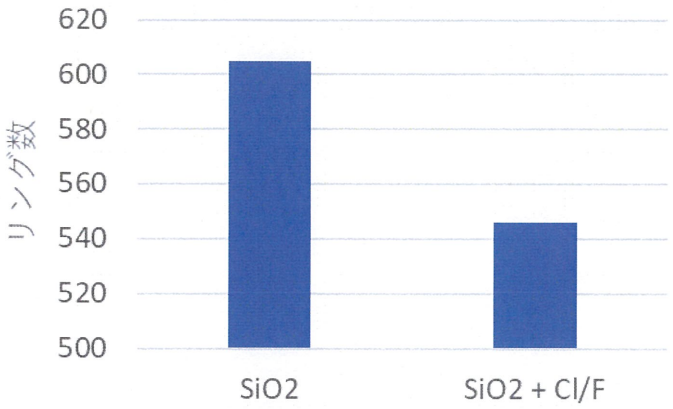

図3. リングの総数.温度は2800K.

1. K. Goetzke and H. J. Klein, J. Non-Cryst. Solids., **127**, 215-220 (1991).
2. X. Yuan and A. N. Cormack, Comp. Mat. Sci., **24**, 343-360 (2002).

2) 社会・経済への波及効果の見通し

非晶質材料であるガラスは結晶に比べて本質的に構造解析が難しく、ガラスを用いる工業製品の特性制御における長年の課題となっている。今回のリング構造も含め第一原理計算を用いた多く解析が報告されているが、モノづくりに役立つ指針をすぐに得られるというレベルには至っていない。

今回、ガラスの特性制御において最も重要な要素の1つである添加元素の影響を解析できたことは、第一原理計算の有用性を示す成果と考えられる。このような解析を発展させ、ガラス構造を原子レベルで突き詰めることにより、モノづくりに役立つ知見、例えば、組成設計やプロセス設計に役立つ知見を引き出すことができ、ガラスの高機能化につながると期待している。

3) その他

特になし。

■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

利用期間中、システムが安定していたため、計画的に計算を実行できました。

2) 利用に関して生じた問題点など

コンパイラがバージョンアップされたことで、計算が正常に実行されなくなったことがありました。はじめ、実行に失敗した原因がシステム上の問題だと気づくことができませんでした。サポートに問い合わせると、対処方法を示していただき、すぐに解決することができました。計算実行に影響を与えるシステム変更の場合は、影響範囲などをお知らせいただけると助かります。

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

並列性能のベンチマーク取得、仮想ノード数・コア数の適切な設定についてサポートいただけると助かります。

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

定期保守の年間計画があれば事前に教えていただけると助かります。

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

特にありません。

2020年4月27日

九州大学　情報統括本部　情報ｼｽﾃﾑ部　情報基盤課　全国共同利用担当御中

〒664-0016 兵庫県伊丹市昆陽北１－１－１
住友電気工業株式会社
解析技術研究センター
大塚　順
TEL：045-853-7260
FAX：045-851-4500

書類送付御案内

拝啓　時下ますます御清栄のこととお喜び申し上げます。平素は格別の御高配にあずかり厚く御礼申し上げます。

下記書類を同封いたしますので、宜しくお願い申し上げます。

敬具

記

・民間利用成果報告書・・・・・・・１部

以　上