



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 10月 8日

利用課題名	計算化学・マテリアルズインフォマティクスに基づく材料開発					
課題責任者	企業名	株式会社富士通研究所 				
	フリガナ氏名	オオフチ マリ 大淵 真理 	部署名	デジタルアニーラ・ユニット	職位	シニアマネージャー
	連絡先	住所：〒243-0197 神奈川県厚木市森の里若宮 10-1 E-mail: mari.ohfuti@fujitsu.com		TEL: 046-250-8194 FAX		
利用期間	2020年 5月 1日 ~ 2020年 9月 30日					
利用成果公開延期希望の有無	<input type="checkbox"/> 即時公開 ・ <input checked="" type="checkbox"/> 公開延期 (成果公開予定: 2022年 3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	1	受付日	2020年10月16日	受付印	
------	---	-----	-------------	-----	--

■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

ビッグデータやAI技術の発展に伴い、その膨大な計算量を支えるためのコンピュータが必要である。半導体LSIの微細化によるコンピュータ性能向上は限界を迎えつつあり、画期的な低消費電力デバイスや新原理デバイスなどの次世代デバイス、またそれを実現するための新材料の探索が課題となっている。また、IoT社会を支えるセンサー等に搭載される小型で高性能な電池材料の開発も重要である。

これらの課題に対し、当社では、マテリアルズ・インフォマティクスを利用した材料設計技術を開発している。当利用では、マテリアルズ・インフォマティクスに必須の要素技術である、第一原理計算を始めとする原子スケールからの大規模ナノシミュレーションを大量に行うことを目的とする。電子材料の安定構造探索・電子状態予測・デバイス特性予測や電池材料の高精度な特性予測・メカニズム解析に加えて、ポリマー設計に必要なマルチスケールシミュレーションなどを行う。

2) 利用意義

高性能な電子・電池・ポリマー材料の開発により、AI・IoT技術の進展に貢献することができる。

材料開発事例の創出により、HPCを活用したマテリアルズ・インフォマティクスの産業応用を推進することができる。

3) 必要性

ナノスケールのデバイス・材料開発では、材料の形状やサイズ・界面がその特性に大きく影響するため、数百～数千原子におよぶ大規模な系を高精度な手法で扱うことが望ましい。このような系に対して第一原理計算手法により安定構造の探索やデバイス特性として重要な電子状態計算を行うためには、数百ノードの計算機の利用が必要となる。しかしながら、弊社内で利用可能な計算機リソースは限られている。本利用では、弊社内の計算機では実行困難な電子材料のデバイス特性予測を中心に、最大256ノードを利用する計算を多数実行する。

■成果の概要

1) 本課題で得られた具体的な成果

今回、マテリアルズ・インフォマティクスを利用した材料設計において、新材料探索の基礎となる物性データを取得した。具体的には、分子動力学プログラムLAMMPSを使用して、各種混合材料の物性(熱伝導率など)を計算した。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

・マテリアルズインフォマティクスの進展による材料・デバイス研究開発の加速、および試作・実験回数削減によるコスト・環境負荷低減

3) その他

■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

- ・従来利用の計算機環境よりも高速な計算が可能であることを確認できた。

2) 利用に関して生じた問題点など

- ・LAMMPS ソフトウェアでの複数ノード間並列計算ができなかった。

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

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

- ・保守作業日程の設定に改善を希望します：平日ではなく、休日・祝日に行ってほしい。

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

