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：2021年04月29日

<table>
<tr><td colspan="2">利用課題名</td><td colspan="5">第一原理分子動力学法を用いたアルミめっき液の構造解析</td></tr>
<tr><td rowspan="3">課題責任者</td><td>企業名</td><td colspan="5">住友電気工業</td></tr>
<tr><td>フリガナ
氏名</td><td>オオツカ　ジュン
大塚　順</td><td>部署名</td><td>解析技術研究センター
伊丹研究部</td><td>職位</td><td>主査</td></tr>
<tr><td>連絡先</td><td colspan="3">住　所：〒664-0016
兵庫県伊丹市昆陽北 1-1-1
E-mail：ootsuka-jun@sei.co.jp</td><td colspan="2">TEL 072-771-0618
FAX 072-771-3054</td></tr>
<tr><td colspan="2">利用期間</td><td colspan="5">2020年04月01日　～　2021年03月31日</td></tr>
<tr><td colspan="2">利用成果公開延期希望の有無</td><td colspan="5">■ 即時公開　・　□ 公開延期（成果公開予定：　　年　　月）</td></tr>
</table>

※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	10	受付日 2021年5月20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

めっきはエレクトロニクス製品における重要技術の１つである。特にアルミの電解めっきは、高耐食性と軽量性を兼備し、かつ、複雑形状の基材でも被覆可能という特長を有しているため、多くの用途で活用が期待されている。アルミでは非水溶媒からのめっきが必要であるが、めっき膜質改善のために特殊成分の添加が有効であることが分かっている。

これまで耐食性や配向性などに関する報告はあるが、めっき後に加工する場合も多く、工業的な観点では機械特性も重要であるが、めっき膜の機械特性や組織に関する報告は多くない。我々は膜の機械特性を向上させるための研究を続けており、電流密度などのめっき条件がアルミめっき膜の機械特性に与える影響について、表面観察や組織観察などの物理分析により知見を蓄積してきた。一方、添加剤であるフェナントロリンがめっき膜に巻き込まれて被膜の脆化を引き起こすという問題があり、フェナントロリンとアルミの反応による析出が原因という仮説を立てている。

この仮説を検証するには、第一原理分子動力学法(MD)シミュレーションによりアルミめっき液中の原子配列を明らかにすることが有効と考えており、その計算リソースを確保するため、九州大学情報基盤研究開発センター研究用計算機システムを利用したい。

2） 利用意義

本研究では、アルミめっき液中の原子の運動や配列を高精度でシミュレーションすることを目指している。めっき液は塩化アルミニウムを含むイミダゾリウム系イオン液体であり、さらに微量のフェナントロリンも添加されている。液中の原子や分子は複雑に相互作用していると考えられ、経験的なポテンシャルパラメータを用いる古典MDで解析するのは非常に難しい。また、現実の液組成を再現するための最小のモデル規模は1000原子レベルになる。即ち、スーパーコンピューターを利用して、1000原子規模のモデルで第一原理MDシミュレーションを実施することで、液中の原子の挙動を把握し、現象を本質的に解明できると期待される。

3） 必要性

前述のように、本テーマでは1000原子規模のモデルが必要である。また、充分な統計性を得るには、1fs/step×1000step＝1ps程度のシミュレーション時間が必要と予想される。市販のワークステーションでのテスト計算では、200原子規模で0.1ps程度をシミュレーションするのに1か月の時間を要することが判明しており、本テーマの遂行にはスーパーコンピューター利用が不可欠である。更に、複数条件を同時並行で計算できるため、影響調査する因子を増やし、現象解明の進展に寄与すると期待している。

■成果の概要

1） 本課題で得られた具体的な成果

まず、計算方法確立するため、総原子数50個の小規模モデルでテスト計算を実施した。ソフトはCP2Kを使用し、カットオフ400 RyでMD計算した結果、例えば130℃で系のエネルギーが平衡状態に達するのに、500ステップ程度を要することを確認した。

次に、約1000原子の大規模モデルでプロダクトランを実施した。ITOのシステムAを16ノード使用、フラットMPI並列で約10 psのMD計算を実施したところ、メモリ使用量は192GB、所要時間はジョブの待ち時間も含めて約1か月であった。得られた構造モデルから液中のAl-Cl平均配位数を算出した結果、文献[1]における予想値と整合することを確認し、概ね妥当なシミュレーションとなっていることが確認できた。

[1]上田、宇井：表面技術、Vol.60、No.8 (2009) 491

2） 社会・経済への波及効果の見通し

今回の解析により、Alめっきの機械強度など品質向上を図るためのめっき液設計において、MDシミュレーションによる知見を活用できる目途がたった。

Alめっきは高耐食性と軽量性を兼備する導電材料であり、今後計算解析を適宜活用しながら、各種エレクトロニクス製品への利用拡大を図っていく。

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

1000 原子程度の大規模計算を 1 か月程度で実施できることが判明し、エンジニアリングのツールとして有用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

ジョブ投入後のサスペンドの発生頻度・長さが月によって異なり、実行可能な計算量が月ごとにばらついてしまう点。

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

ソフトウェアの環境構築の支援。

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

可能であれば、実行可能な計算量の平滑化。

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

特になし。