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：2022年04月22日

<table>
<tr><td colspan="2">利用課題名</td><td colspan="6">非晶質及び液体の構造解析</td></tr>
<tr><td rowspan="3">課題責任者</td><td>企業名</td><td colspan="6">住友電気工業株式会社</td></tr>
<tr><td>フリガナ
氏名</td><td>シミズ　トモキ
清水　智規</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 colspan="2">専門職</td></tr>
<tr><td>連絡先</td><td colspan="3">住　所：〒244-8588
神奈川県横浜市栄区田谷町1
E-mail：shimizu-tomoki@sei.co.jp</td><td colspan="3">TEL 050-3364-5471
FAX 045-851-4500</td></tr>
<tr><td colspan="2">利用期間</td><td colspan="6">2021年04月01日　～　2022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="6">■ 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	2	受付日 2022年　4月　21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

各種の光学部品や半導体デバイスなどの製品で、SiO2、SiNx、B2O3 などの非晶質材料が多用されている。これらの光学的、力学的、あるいは、電気的特性を制御するには、材料の構造を原子レベルで把握することが基本的に重要である。しかし、非晶質では結晶のような周期構造が存在せず、実験的な構造解析が難しいという問題がある。

また、各種エレクトロニクス製品の製造では、電解めっきや洗浄など溶液プロセスが不可欠である。めっき液や洗浄液には、所定の機能を発現させるため種々の添加剤を入れるなど複雑な組成になることもある。液体も前述の非晶質同様に周期構造が存在せず、実験的に構造を把握するには限界がある。

上記の問題に対し、シミュレーションの活用が有効と期待されている。具体的には、第一原理計算に基づいた分子動力学法(MD)シミュレーションにより、非晶質や液体の原子配列を高精度で計算することが可能となる。ただし、得られた構造モデルから物性を予測するには、数百原子以上の比較的大規模なモデルが必要となる場合が多い。このようなケースでは、通常のサーバーでは負荷が大きすぎるため、スーパーコンピュータの利用が必要となる。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、非晶質あるいは液体の原子配列を、できるだけ大規模なモデルでシミュレーションすることが重要である。特性の鍵握る数%程度の添加元素あるいは添加分子が存在する場合、最大で 1000 原子規模のモデルが必要と想定している。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、材料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

前節で述べたように、本テーマでミニマムのモデル規模として 1000 原子程度が必要である。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。これまで市販のワークステーションを用いたテスト計算では、モデル規模として 200 原子程度、シミュレーション時間 0.1ps 程度を実現するのに 1 か月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

Na2O・3SiO2(全 900 原子)のモデルで、1173K で溶融中の原子配列を第一原理 MD で計算した。ソフトは FEMTECK を用いた。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全相関関数を算出した結果、下図のように実験結果と整合することを確認し、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。

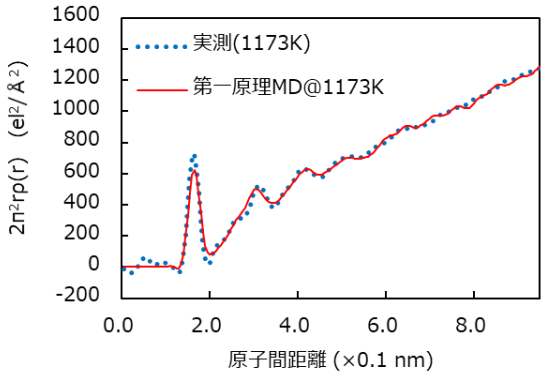

図　第一原理 MD シミュレーションモデルから計算した溶融 Na2O・3SiO2 ガラスの全相関関数

(実測データは　Y. Saito et al: Journal of the Ceramic Society of Japan, 124 [6] (2016) 717-720 を参照)

2） 社会・経済への波及効果の見通し

今回の解析により、SiO2 などのガラス材料の構造に関し、第一原理 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。ガラスは光学部品の材料として重要であり、今後計算解析を適宜活用しながら、製品開発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

900 原子の大規模計算を 1 か月程度で実施できることが判明し、実験結果とも整合しており、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

ジョブ投入後の待ち時間がマシンの込み具合によって異なり、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。