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： 2023 年　3 月　28 日

<table>
<tr><td colspan="2">利 用 課 題 名</td><td colspan="5">ガラスの高温溶融中の構造と動的物性の解析</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
横浜研究部</td><td>職 位</td><td></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="2">TEL 050-3364-5471
FAX 045-851-4500</td></tr>
<tr><td colspan="2">利　用　期　間</td><td colspan="5">2022 年　4 月　1 日　～　　2023 年　2 月　28 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		受付日 年　　月　　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

レンズなどの光学部品では、SiO2 やB2O3 などのガラス材料が多用されている。これらの特性を制御するには、高温溶融中の原子配位構造及び拡散係数などの動的物性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、高温での構造や物性の測定は容易ではない。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、非晶質の原子配列と動的物性を計算することが可能となる。ただし、高精度の計算には、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、非晶質の構造と物性を、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。特性の鍵を握る数%程度の添加元素あるいは添加分子が存在する場合、最小で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は必要と予想される。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

本課題では、約400 原子のSiO2 ガラスのモデルで第一原理MD シミュレーションを実施し、平均二乗変位の時間依存性から拡散係数を計算した。計算ソフトとして産総研が開発したFEMTECK、及び、フリーソフトのCP2K を使用した。0.1ps の計算に要する時間は、FEMTECK では平均0.37 時間、CP2K では平均1.86 時間となり、ワークステーションで実施する場合の予想に比べて大幅に短縮できることを確認できた。計算結果の例として、図1にSiO2 ガラスにおけるSi 原子の拡散係数を温度の逆数に対してプロットしたものを示す(cf. FEMTECK による計算結果)。

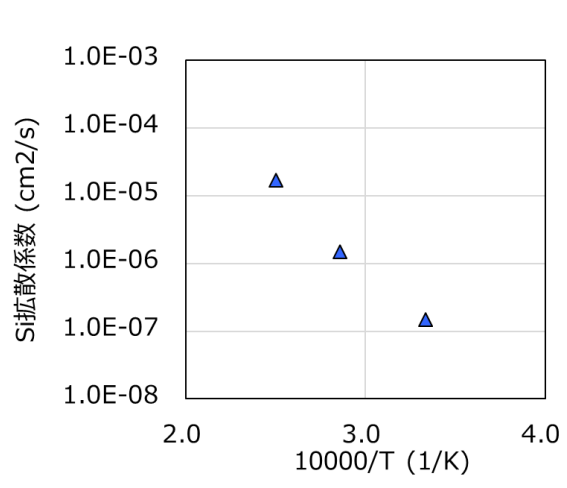

図 1　Si の拡散係数

2) 社会・経済への波及効果の見通し

ガラスは光学部品材料として重要であり、現代社会において欠かせないものとなっている。今回、SiO2 ガラスの高温領域における原子の動的挙動を比較的短時間で計算できることを確認できた。本課題で得られた知見や計算手法を活用し、高機能な光学部品の開発を加速していきたい。

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

社内の計算機では現実的な時間で計算することが難しい数百原子以上のモデルでの第一原理分子動力学計算を複数ケース実施出来た点が非常に有益でした。

2) 利用に関して生じた問題点など

共有タイプのため仕方が無い部分がありますが、年間を通して一度に利用できる計算リソースが安定しない点が少し気になりました。

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

ジョブを効率的に実行するためのスクリプトの工夫などがあれば、伺ってみたいと感じました。

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

年間を通して一度に利用できる計算リソースが安定するとありがたいです。

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。