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：2024年02月28日

<table>
<tr><td colspan="2">利用課題名</td><td colspan="5">金属/樹脂界面の構造解析</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">2023年4月1日　～　2024年2月29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

各種エレクトロニクス製品では、Cu などの金属を樹脂や防錆剤で保護する必要がある。金属と樹脂や防錆剤の界面が強固に密着する場合、界面で化学結合が形成されていることが想定されるが、そのメカニズムは未解明の部分が多い。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、金属/樹脂間の化学結合を高精度で計算することが有効と考えている。ただし、実際の界面の結合状態を評価するためには、数百原子以上の比較的大規模なモデルが必要となる。このような大規模な系の第一原理 MD 計算を市販のワークステーションで実施することは現実的でなく、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、金属/樹脂界面の化学結合を、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、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・分子の挙動を把握し、現象の本質を解明できると期待される。

3) 必要性

前節で述べたように、本テーマで実施する第一原理 MD 計算では、最大で 1000 原子程度のモデルを予定している。また、充分な統計精度を得るには、定常状態に至ってから少なくとも 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 か月以上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の利用が不可欠である。加えて、複数条件を同時並行で計算できれば、界面状態に影響を及ぼし得る因子を複数検討することができ、現象解明の加速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

防錆剤のメチルベンゾトリアゾール分子を Cu 結晶(100 面)上に配置したものを初期構造とし、設定温度 80℃の NVT アンサンブルにて約 80ps の第一原理 MD 計算を実施した(cf. 実際の Cu 金属を模擬するため、表面 Cu 原子の一部を O 原子で置換したものを使用)。ソフトは CP2K を用いた。図に計算結果の例を示す。数 ps 後に防錆剤分子から H 原子 1 個が離脱し、Cu 原子と防錆剤の N 原子の間に結合が生成することが明らかとなった。更に 80ps まで、Cu-N 結合が安定に維持されることも確認されている。今回の解析から、防錆剤分子の結合部位と安定性を計算で評価できると考えられる。

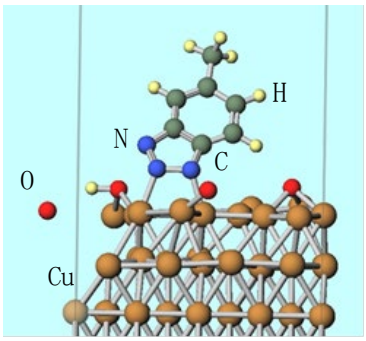

図　Cu 結晶とメチルベンゾトリアゾール界面の
第一原理 MD シミュレーションの結果

2) 社会・経済への波及効果の見通し

今回と同様の解析を各種の金属や防錆剤の組み合わせに対して実施することで、製品性能に関して一定の予測が可能となり、効率的な材料開発につながると期待できる。

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

市販のワークステーションでは実行不可能であるような大規模計算を複数実行することが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

複数の計算をほとんど待ち時間なしで同時に実行できる場合もあれば、全ての計算が1日以上実行待ちとなるような場合もあり、実行可能な計算量のばらつきが大きく、またその予測が困難である点が運用上やや難しいと感じました。

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

特にありません。

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

実行可能な計算量が平滑化されると有難いです。

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。