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： 令和元年 5 月 27 日

利用課題名		Random Structure Searching による新規誘電体・圧電体・固体電解質の第一原理的探索				
課題責任者	企業名	株式会社 村田製作所				
	フリガナ 氏名	ヒライ ダイスケ 平井 大介 印	部署名	新規技術センター 先端技術研究開発部 開発1課	職位	なし
	連絡先	住 所：〒520-2393 滋賀県野洲市大篠原 2288 E-mail：daisuke.hirai@murata.com		TEL 077-586-8778 FAX 077-586-8798		
利用期間		2018 年 12 月 1 日 ～ 2019 年 3 月 31 日				
利用成果公開延期希望の有無		☑ 即時公開 ・ ☐ 公開延期（成果公開予定： 年 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	4	受付日 2019年 5月30日	受付印	上田

■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

村田製作所では、新規誘電体・圧電体・固体電解質材料の開発に向けた研究を行っている。組成を振りながら材料物性の調査および最適化をするのが材料探索手法としてオーソドックスであるが、その構造の同定が実験的に困難であるため、設計指針を立てることができないことが課題となっている。

そこで本課題では、第一原理計算に基づくrandom structure searchingにより、任意の組成における結晶構造の推定を行う。任意の組成における構造が明らかとなれば、その物性計算が可能となり、新規誘電体・圧電体・固体電解質の設計指針を理論的提案することができる。

2） 利用意義

単純な組成を持つ典型的な物質の第一原理計算はこれまでに多くの成果を残してきたが、実際に使われている材料の組成は複雑であり、その複雑な組成が豊かな機能を生み出していることは、これまで数多くの実験が示してきたが、このような材料の構造の実験的な同定は難しい。この解決策として、第一原理計算に基づく構造推定が考えられるが、組成の複雑さゆえに計算に用いるセルに100以上の原子が含まれること、そして、そもそも結晶構造が未知であることが、この問題を難しくしている。

第一原理計算を用いてこのような物質の構造を実際に推定するためには、多くの構造をサンプリングし、そのエネルギーを比較することが一つの方法である。しかし、そのためには、100~1000程度のサンプル構造の第一原理計算を必要とすることが常である。大きな計算コストが要求される課題であるが、実験パラメータを用いない第一原理計算に基づいて構造推定ができれば、新たな材料設計指針の導出につながることが期待される。

このような背景から、本課題は大規模計算に分類されるが、現実的な材料設計に向けた本テーマの第一原理計算は、貴学の有する計算機を利用する意義が大きいと考える。

3） 必要性

複雑な組成を持つ物質のポテンシャルは大きいが、そのユニットセルは100原子以上を含むことが普通であり、random structure searchingによりこれをサンプリングするためには、豊富な計算リソースが必須である。新規誘電体・圧電体・固体電解質材料の探索を効率的に実施するためには、大型計算機が必要であり、本課題申請に至った。

■成果の概要

1） 本課題で得られた具体的な成果

AIRSS（Ab Initio Random Structure Searching）というrandom structure searchingのソフトウェアを用いて、その開発者の論文の再現計算を試みた。具体的には$Li_{1-x}P_x$の構造探索を対象とし、一つの組成に対して1000～2000の電子状態計算を実施した。LiPやLi_3Pのようにprimitive cellに含まれる原子数が少ないものに対しては比較的簡単に最安定構造を得ることができた。一方、LiP_7のようにprimitive cell内の原子数が50を超えるような場合では、最安定構造を見つけることは難しかった。また、あらかじめprimitive cellに含まれる原子数（化学式の数）が未知であることも本質的な課題である。対称操作の数をオプションとして指定できるが、この指定の仕方で推定される構造が絞られてしまうことも網羅的構造探索において注意すべき点である。このような計算は社内計算機では到底不可能であり、大型計算機を使用して初めて実施できた。

すでに構造が知られている比較的構造が複雑なタングステンブロンズ構造についても上述のような探索を行ったが、最安定構造を見つけることはやはり難しく、primitive cellに含まれる原子数が増えるほどrandom structure searchingによる構造探索の難易度は高くなることが分かった。

2） 社会・経済への波及効果の見通し

組成のみからその最安定構造を見つける計算技術は、計算駆動の物質探索の可能性を大きく広げる。新しい構造を発見することは分野によらず重要である。組成のみから構造を見つけることは技術的にもまだ難しいが、この方法が確立されれば、未踏物質へのアプローチが加速し、新材料開発へ大きく貢献できると考えられる。

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

高性能なスパコンを低価格で使用できたことは大変有益でした。

2) 利用に関して生じた問題点など

特になし。

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

特になし。

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

特になし。

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。