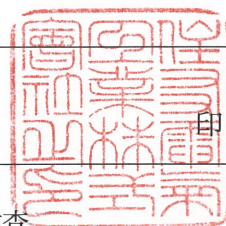


九州大学情報基盤研究開発センター  
民間利用成果報告書

提出日： 2019 年 5 月 30 日

利用課題名	第一原理分子動力学計算によるガラスの構造シミュレーション					
課題責任者	企業名	住友電気工業株式会社				
	フリガナ氏名	オオツカ ジュン 大塚 順	部署名	解析技術研究センター	職位	主査
	連絡先	住所：〒664-0016 兵庫県伊丹市昆陽北 1-1-1 E-mail：ootsuka-jun@sei.co.jp		TEL 072-771-0618 FAX 072-771-3054		
利用期間	2018 年 4 月 1 日 ～ 2019 年 3 月 31 日					
利用成果公開延期希望の有無	<input checked="" type="checkbox"/> 即時公開 ・ <input type="checkbox"/> 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	5	受付日	2019年 6月 4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

石英系ガラスは建材や光学機器など幅広い分野で利用されており、用途に応じて種々の元素が添加される。必要な機能を発現させるには添加元素の配位構造や Si-O リング構造の制御が重要であり、これらは熔融あるいは冷却過程での原子の動きに左右される。しかし、非晶質であるため構造を一義的に決めることは困難であり、更に、プロセス温度が数百～数千℃に及ぶため実験的な解析にも限界がある。

本研究の目的は、高温でのガラス中の原子の挙動を分子動力学 (MD) シミュレーションで解明することにある。

### 2) 利用意義

第一原理 MD のシミュレーションソフトとして、産業技術総合研究所の土田氏が開発した FEMTECK (Finite Element Method based Total Energy Calculation Kit) を利用する。同ソフトにはオーダーN 法が実装されており、これをスパコンと組み合わせることで 1000 原子程度の大規模モデルでも現実的な時間で計算できるようになる。

### 3) 必要性

実際のガラス組成を模擬するには 1,000 原子規模のモデルが必要であり、第一原理 MD 計算の実行に要する計算リソースが非常に大きくなる。社内で保有する解析サーバでは計算リソースが不十分なため、スーパーコンピュータを利用したい。

## ■成果の概要

### 1) 本課題で得られた具体的な成果

第一原理 MD 計算で得られたガラス構造を検証した。ガラス組成やプロセス条件と配位構造などの関係について、第一原理 MD 計算の方が古典 MD 計算よりもガラス構造を精度良く予測できることが分かった。

第一原理 MD 計算から求めたガラス構造から非架橋酸素数と結合開裂数を求めたところ (図 1)、両者に正の相関関係があることが分かった。Si 原子の平均二乗変位を評価すると (図 2)、SiO<sub>2</sub> のみのときより Cl/F を添加した方が原子の動きが大きかった。これらより、原子の動きが大きいほど、結合開裂・非架橋酸素数が増えることが示された。

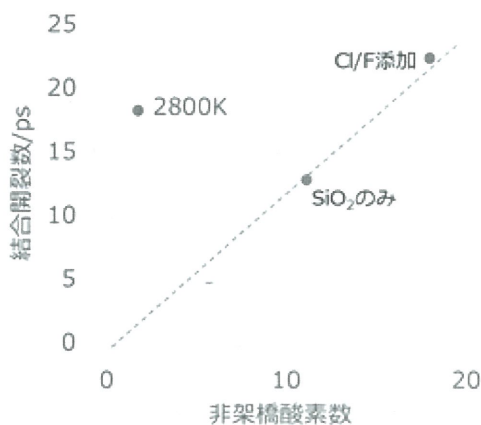


図 1. 非架橋酸素と結合開裂

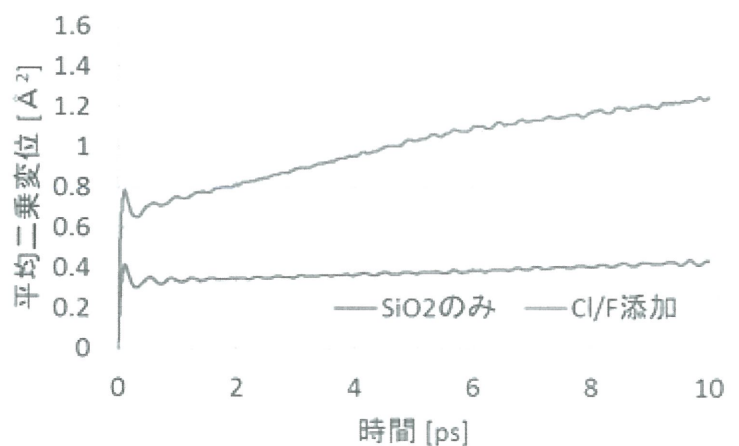


図 2. Si 原子の平均二乗変位、温度は 2800K.

2) 社会・経済への波及効果の見通し

石英ガラスに対する添加元素の効果をナノレベルで解き明かすことにより、広範なガラス材料を高度化するための知見につながる。ナノテクノロジーに基づいたモノづくりを進めることで、日本の材料科学技術が国際競争力を維持することに貢献できる。

3) その他

■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

計算システムを安定的に運営いただきありがとうございます。研究計画を順調に進めることができました。

2) 利用に関して生じた問題点など

特にありません。

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

平成 30 年度の利用では問題ありませんでしたが、エラー時にスピーディーに対応いただけると助かります。

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

期中に利用ノード数を調整できると助かります。例えば、来月利用しない代わりに、今月のノード数の上限を 2 倍にするという使い方です。

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

今年度中に学会発表することを検討中です。