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 27 日

利用課題名		第一原理分子動力学法を用いたガラス材料の検討				
課題責任者	企業名	AGC 株式会社 印				
	フリガナ 氏名	今村 穣 印	部署名	先端技術研究所	職位	マネジャー
	連絡先	住所：〒221-0863 神奈川県横浜市神奈川区羽沢町 1150 E-mail：yutaka.imamura@agc.com		TEL 045-374-7566 FAX		
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		☑ 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	6	受付日 2019年 6月10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

第一原理分子動力学法を用いてガラス材料の幾何学的構造・物性に関して検討を行う。

2） 利用意義

これまでガラスのシミュレーションでは、主に古典分子動力学法を用いられてきた。古典分子動力学法によるガラス材料の検討には適切に記述できるポテンシャルの準備が必要だが、新規材料ではポテンシャルの準備が困難であった。一方、計算ソフトウェアや計算環境の向上などにより、ポテンシャルを必要としない第一原理計算に基づく分子動力学法の計算が可能となってきた。そこで、本研究では、第一原理分子動力学法を用いてガラス材料を計算する。さらに、古典分子動力学計算で得られた幾何学的構造・物性と比較・議論を行う。また、実験値との比較を通して第一原理分子動力学法の問題点も明らかにする。

3） 必要性

古典・第一原理分子動力学法の数値検証を行うことで、古典分子動力学法の適用範囲・第一原理分子動力学法の問題点を明らかにし、計算対象に対して適切な計算手法を選べるようにする。

■成果の概要

1） 本課題で得られた具体的な成果

Si, Al, O などの元素を含むガラス材料の第一原理分子動力学計算を行った。古典分子動力学と比較すると計算速度差は歴然としているが、初期構造を適切に選択すれば、適切な電子状態に基づく短時間の分子動力学計算が可能なことがわかった。具体的には、数百原子程度であれば 4 ノードを用いれば一か月程度で 100ps 程度のシミュレーションが可能なことがわかった。得られた結果に関しては、特に難しい系ではなかったこともあり、動径分布などに関しては古典分子動力学と大きな差は確認できなかった。組成が異なることの定性的な変化も、第一原理分子動力学法で記述できていた。

2） 社会・経済への波及効果の見通し

将来的にターゲットとなる一般的ではない無機物質組成は、古典分子動力学において適切なポテンシャルが無く実行が困難な場合が予測されるが、数百原子程度であれば第一原理分子動力学を用いることで 100ps 程度のシミュレーションが可能であることがわかった。これは新材料開発の促進につながると考えられる。

3） その他

特に無し。

■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

同時に複数ジョブが流せてよかった。

2) 利用に関して生じた問題点など

ジョブキューの実行時間が短いように思った。例えば、
4 ノードのジョブキューならば、48 時間よりも長い 72 時間や 96 時間があれば良いと思った。

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

特に無し

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

リクエストに関して迅速に対応して頂いており特に不満はない。

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

特に無し。