

1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

新材料の探索を実現するためには、多様で複雑なナノ構造を取り扱う必要があり、その種類は数万にも及ぶ場合がある。そのため、高精度な手法を高速に効率よく実行するための技術開発が必要である。しかしながら、このような先端シミュレーションの産業応用は開発の途上にある。電池材料の電子状態を中心に解析し、機械学習用教師データの蓄積及び学習結果の検証を実施する。また、化学材料の原子レベルシミュレーションとマクロな熱力学物性をつなげる技術の開発も行う。

2) 利用意義(産業利用の観点から)

将来のビッグデータや人工知能技術の発展に伴い、その膨大な計算量を支えるためのコンピュータが必要となることは言うまでもない。半導体の微細化による性能向上は限界を迎えつつあり、画期的な低消費電力デバイスや新原理デバイスなどの次世代デバイス、またそれを実現するための新材料の探索が必要である。これらの研究・開発において、第一原理計算をはじめとする原子スケールからのナノシミュレーションは、もはや実験と並ぶ、必要不可欠な手段となっている。

3) スーパーコンピュータを利用する必要性

ナノスケールのデバイス・材料開発では、材料の形状やサイズ・界面がその特性に大きく影響するため、数1000原子におよぶ大規模な系を高精度な手法で扱うことが望ましい。このような系に対して第一原理計算手法によりデバイス特性として重要な電子状態計算を行うためには、数100ノードの計算機の利用が必要となる。また、新材料探索においずは、多様で複雑なナノ構造を取り扱う必要があり、その種類は数万にも及ぶ場合がある。これらを効率よく探索するためにはこれらの計算を複数並列で計算できることが望ましい。

しかしながら、先にも述べたように、このような先端シミュレーションの産業応用は開発の途上にあり、必ずしも普及しているわけではないことから、社内で利用可能なリソースは限られている。電池材料の電子状態解析を中心に、主に自グループの計算機では実行困難な100から数100ノードを利用する計算を多数実行する。

2. 成果の概要

9) 本利用で得られた成果(成果が得られなかった場合はその理由)

※9) を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

((1. 計算科学、2. コンピュータ・サイエンス、3. プログラムチューニング、4. その他)

・昨年度に引き続き、カーボンナノチューブ(CNT)に対する界面活性剤吸着の電子状態計算やそれらに基づく物性予測を行った。CNTの欠陥の種類と界面活性剤の種類を組み合わせて網羅的に計算し、それぞれの安定吸着構造や吸着エネルギー、バンド構造等を調べ、実験結果との比較を行った。

・弊社で開発した新規電池材料の性能発見メカニズムを解析するための第一原理計算を行った20年度論文化を計画している。

・化学材料の原子レベルシミュレーションによって熱力学物性を予測するため、古典分子動力学計算プログラムLAMMPSを導入した。

化学材料の構造同定を目的に、第一原理計算コードQuantumEspressoに実装されたラマンスペクトル予測のベンチマークを行った。

関連成果発表

1. H.Jippo and M.Ohuchi, "Interaction between defective carbon nanotube and surfactant molecules", The 57th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium (2019/09)

2) 社会・経済への波及効果の見通し

・計算化学やマテリアルズ・インフォマティクスによる材料探索の推進

3) その他の成果