

---

## 1. 利用の概略

### 1) 利用目的・内容

大規模な原子・分子レベルのシミュレーションを行うことで、当社で開発を行っている半導体・ディスプレイ材料の機能発現メカニズムを明らかにし、材料開発上の有益な知見を得ることを目的とする。

---

### 2) 利用意義（産業利用の銀点から）

半導体・ディスプレイ等の機能性材料の材料特性を制御するために、原子・分子レベルでの現象理解が必要である。そのためのツールとして、シミュレーションは有効な手段であり、当社はこれまでもシミュレーション技術を活用することで、材料開発上の有益な知見を獲得してきた。－

---

### 3) スーパーコンピュータを利用する必要

DFT計算で、材料設計上有用な知見を得るためには数百原子規模の計算を多数実行する必要がある、かつなるべく短納期（一週間以内程度）で、結果を得る必要がある。そのためには相応の計算資源が必要であり、当社内でその規模の計算資源を用意するより、スパコンを利用する方がコスト面で優位なため。

---

## 2. 成果の概要

### 1) 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）

**a** ※内容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）

周期系 DFT計算コードのQuantumEspresso を用いて、有機分子と固体表面間の相互作用状態の解析を行った。構造最適化計算の結果得られた安定構造のエネルギーから、各有機分子と固体表面との相互作用の強さを見積もった。有機分子の分子構造と固体表面の構造を変えた計算を多数行い、有機無機界面の密着性の強さを制御するうえで、有益な知見を獲得することができた。

---

### 2) 社会・経済への波及効果の見通し

**a** 本利用を通じて、当社で開発を行っている半導体・ディスプレイ材料の機能発現メカニズムに対する理解が進んだ。本利用で得られた知見を材料開発にフィードバックすることで、開発期間の短縮やより高機能な材料の開発に繋がると考える。

---

### 3) その他の成果

特になし。