

Title	北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告2017
Author(s)	井口, 寧; 本郷, 研太; 宮下, 夏苗
Citation	Technical memorandum (School of Information Science, Graduate School of Advanced Science and Technology, Japan Advanced Institute of Science and Technology), IS-TM-2018-002: 1-60
Issue Date	2018-11-30
Type	Others
Text version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/10119/15486
Rights	
Description	テクニカルメモランダム (北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科情報科学系)

北陸先端科学技術大学院大学
共有計算サーバ使用成果報告 2017

井口寧, 本郷研太, 宮下夏苗 編
2018年11月30日
IS-TM-2018-002

北陸先端科学技術大学院大学
情報社会基盤研究センター
〒923-1292 石川県能美市旭台 1-1

要旨

本報告は北陸先端科学技術大学院大学において、学内で共同利用されている計算サーバや並列計算機を用いて、2017年度に行われた先端的諸研究の概要および発表論文について、各利用者の協力に基づいて報告を頂き、一編の報告書として取りまとめたものである。

目次

1. JAIST における共有計算サーバー環境 1

2. 情報科学分野の計算サーバー利用研究 5

オセロフロントに関する研究

谷口智子, 上原隆平

単位角度で制限された単頂点折り紙の畳み方の列挙

大内康

グラフの同型性を考慮した教え上げ

山崎一明

GPU のための疎行列格納方式に対する圧縮率向上スキームに関する研究

河村知記

第一原理計算による物質化学シミュレーション

本郷研太

The Investigation of Hydrodeoxygenation (HDO) and Decarbonylation (DCO)
Process of Methyl Butanoate on NiMoS Surfaces: Ab Initio Study

Ryo Maezono

GAN Bandgap Calculation Using QMC

Ryo Maezono

DMC study of TiO₂

Ryo Maezono

Investigation of TiO₂ surface reactivity

Ryo Maezono

Anharmonic Calculations in Hybrid Perovskite Solar Cells

Ryo Maezono

TDDFT study of cage clusters

Ryo Maezono

Quantum Monte Carlo study of the energetics of rutile, anatase, brookite, and
columbite TiO₂ polymorphs

Ryo Maezono

THE EFFECTS OF GRAPHENE AND Ag-NANOFLOWERS AS A
FORMATION FLEXIBLE SERS SUBSTRATE

Apichai Jomphoak, Ryo Maezono

A Post-Hartree-Fock, DMC and DFT Calculation for Energy to linearisation and
their trends for Disiloxane

Guo Chao, Ryo Maezono, Kenta Hongo

Scalable dynamic locality-sensitive hashing for Structured dataset on Main memory
and GPGPU memory

Toan Nguyen Mau

MOLECULAR INTERACTIONS IN INCLUSION OF COMPLEXES WITH
CYCLODEXTRINS

Ornin Srihakulung, Kenta Hongo, Ryo Maezono

A New Ab Initio Modeling Scheme for Ion Self-diffusion Coefficient Applied to
 ϵ -Cu₃Sn Phase of Cu-Sn alloy

Tom Ichibha, Genki Prayogo, Kenta Hongo, Ryo Maezono

Comparison of Post Analyses of Quantum Monte Carlo Calculations

Tom Ichibha, Kenta Hongo, Ryo Maezono, A.J.W. Thom

Very Fast Diffusion of Ti Interstitial Defect in [001] Direction in Bulk Rutile TiO₂:
A Diffusion Monte Carlo Study

Tom Ichibha, Anouar Benali, Kenta Hongo, Ryo Maezono

Hydrogen Crystal Phase Diagram Updated by Quantum Monte Carlo and
Anharmonic Phonon Calculations

Tom Ichibha, Yunwei Zhang, Anouar Benali, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Yanming Ma

Adhesion of electrodes on diamond (111) surface: A DFT study

Tom Ichibha, Kenta Hongo, I. Motochi, N.W. Makau, G.O. Amolo, Ryo Maezono

DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY OF HYDRODEOXYGENATION
AND DECARBONILATION MECHANISM OF METHYL BUTANOATE ON
NIMOS SURFACES.

Hermawan Kresno Dipojono, Ryo Maezono

FINITE TEMPERATURE PROPERTIES OF HIGH PRESSURE HYDROGEN

Bartomeu Monserrat, Ryo Maezono

ANHARMONIC CALCULATIONS IN CALCIUM SILICATE UNDER
EXTREME CONDITIONS AND HYBRID PEROVSKITE SOLAR CELLS

Joseph Prentice, Ryo Maezono

First Principle Calculations of Electronic and Phonon Properties of ThCr₂Si₂-Type Structure

Aniwat Kesorn, Kenta Hongo, and Ryo Maezono

First principle Study of H₂O Molecule Adsorption and Dissociation on CuO Catalyst Surface

Faozan, Ryo Maezono

Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions

Hunkao Rutchapon, Kenta Hongo, Ryo Maezono

METAL-BLACK PHOSPHORUS CONTACTS: A DFT STUDY

Sujoy Saha, Ryo Maezono

3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバー利用研究 34

Single-Molecule Imaging of a Polymer and All-atom MD Simulations

井改知幸, 篠原健一

分子シミュレーションを用いた糖鎖の配座空間探査

山口拓実

High proton conduction of organized sulfonated polyimide thin films with planar and bent backbones

Yutaro Ono, Yuki Nagao

C. elegans の集団運動の数理モデルに関する研究

永井 健

First-principles study of interaction of nitrogen beam with silicon and carbon dioxide molecule adsorption on graphene under external electric field

Muruganathan Manoharan

自発的な分子集合体の形成とその外場応答

下川 直史, 樋口 祐次, 伊藤 弘明

硫化物熱電材料のハイスループッドスクリーニングに関する研究

宮田全展

Gaussian16 を用いた有機化合物の分子間力の計算

高岸秀行

FIRST-PRINCIPLES ASSESSMENT OF ND-FE-B THERMODYNAMIC PROPERTIES FOR APPLICATION IN CALPHAD

Adie Tri Hanindriyo, Soumya Sridar, Hari Kumar, Kenta Hongo, Ryo Maezono

DIFFUSION MONTE CARLO STUDY OF BORON NITRIDE SYSTEMS
Genki Prayogo, Ryo Maezono

DIFFUSION MONTE CARLO STUDY ON POLYTYPIC STABILITY OF
SILICON CARBIDE
Genki Prayogo, Ryo Maezono

機械学習を用いた Ziegler-Natta 触媒の一次粒子構造の決定
高棹 玄德, 谷池俊明

Evolution of pz orbital with out-of-plane electric field in bilayer graphene
K. Afsal

ナノスケールにおける遷移金属の弾性率算定
石塚慧介

ポリマー系における第一原理熱伝導率の評価
Keishu Utimula, Tom Ichibha, Ryo Maezono, Kenta Hongo

ADHESION OF THE ELECTRODES ON BLACK PHOSPHORUS DEVICE
SURFACES
Nobuya Watanabue, Tom Ichibha, Kenta Hongo, Ryo Maezono

DFT calculations for hybridizations of electron orbitals in P-B pairs embedded in Si
nano clusters
Manoharan, Le The Anh

First-Principles Simulations Assisted Development of Catalysts in Fuel Cells
Guoliang Chai

InSb 及び Sb₂Te₃ の電子状態および光学誘電率の第一原理計算
佐野陽之

MU-MIMO システムのための低演算量 LS ターボチャネル推定法
高野泰洋

1. JAIST における共有計算サーバ環境

情報社会基盤研究センター 井口寧, 本郷研太, 宮下夏苗

1.1 概要

北陸先端科学技術大学院大学 (JAIST) では, 全学で共有利用可能な計算サーバは, その利用者が参加する MPC グループを中心として MPC グループの取りまとめを行う MPC 管理グループと計算機の実務的な運用を担当する情報社会基盤研究センター (以下情報センター) とが親密な連携をとりながら運用されている. MPC グループは共有計算サーバの利用者から構成されるグループであり, MPC 管理グループは MPC グループのユーザーからの声を吸い上げキュークラスの設定の調整として反映することや mpc メーリングリストにおける利用者間の利用の調停を行っている. 情報センターと MPC グループ・MPC 管理グループの関係は参考文献 [9]や[10]を参照願いたい.

1.2 2017 年度の活動

2017 年度の JAIST における MPC グループおよび MPC 管理グループの主だった活動について述べる. 2017 年 4 月には利用者の多い Gaussian09, GaussView5 について, それぞれ後継バージョンの Gaussian16, GaussView6 の提供を開始した. また, 2017 年 5 月には CUDA を更新, CUDNN をインストールし, 利用率の高いディープラーニングツールである TensorFlow をサンプルにライブラリの組み込みを確認した. 各種並列計算機ユーザの技術レベルの向上, 理解の促進を目的とし, 各システム, ソフトウェアに関する利用者講習会を企画すると同時に, 実際の研究活動におけるスパコン活用例を知るために, 統計科学をテーマとして, 情報社会基盤研究センターセミナー, 及び, 本学と包括的研究協定を締結している統計数理研究所との共催でシンポジウムを開催した. 今年度で開催した講習会等の一覧を表 1 に示す. 例年開催している MPI, OpenMP など並列プログラミングをテーマとした講習会のほか, 汎用的な計算ツールとして有名な MATLAB の講習会を企画した. 表 1 には記載していないが, 計算機で利用者の多い Origin Pro や Mathematica など各種ソフトウェアの講習会を開催し, 計算機で実行する前の基本的なソフトウェア利用, データ作成などについて学ぶ機会も提供している.

表1: 2017 年度に開催された講習会・シンポジウム・セミナー一覧

開催月	講習会・シンポジウム・セミナー
2018 年 1-2 月	第 2 回 JAIST-ISM シンポジウム+KIST
2018 年 1 月	情報社会基盤研究センターセミナー「統計的データ解析・計算統計学・データサイエンスー統計数理とスパコンー」
2017 年 11 月	MATLAB 並列コンピューティングワークショップ@PC Cluster Server
2017 年 6 月	Cray XC40/並列プログラミング 初級者講習会 SGI UV3000 / Parallel Programming 初級者講習会 大規模計算機初級者講習会 - PC クラスタを使ってみよう 並列計算機利用者オリエンテーション

1.3 新規導入・更新システム

次に、2017年に稼働した計算サーバの概要を表2に示す。2016年12月に稼働したCray XC40は、高速コンピュータシステム世界ランキングTop500において2017年6月時の337位にランクインした。夏には同XC40のパワーキャッピング機能を実運用にうつし、機器全体の10%~20%の電力消費を抑えられることを確認した。

1.4 まとめ

本報告「北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告2017」は2017年度に情報センター提供の共有計算サーバを利用した研究の概要とその成果を報告している。mpcメーリングリストを通じて、MPC管理グループと情報センターから本報告への寄稿依頼を行い、各著者のご厚意により、情報科学分野から28件、材料科学分野から20件と多彩な報告書を提出いただいた。ここに深く感謝申し上げる。

現在、これまで計算機とあまり縁のなかった研究分野でも計算機実験が容易に実施できるようになり、最先端の教育研究活動を開拓、実施、展開する上での強力な研究基盤として、計算機の重要性は増している。システム利用状況の把握は、利用実績のある研究分野に対するサポート強化だけではなく、新規利用の研究分野を見出すことで、本学における新しい教育研究展開の潮流を知ることができる。こうした教育研究展開の把握は、将来的には、次期計算サーバ導入時の重要な策定指針となり、より充実した計算機環境の構築に繋がるものと期待される。寄稿報告を俯瞰すれば、共有計算サーバは本学の教育研究インフラとして幅広い研究分野で利活用されている様子が見て取れる。共有計算サーバは、本学の先端的な教育研究活動をこれまで以上に躍進させる必須の教育研究基盤として、今後益々、その重要性が増していくものと期待される。

表2: JAISTで利用可能な計算サーバ(2017)

機種名	主な仕様
Cray XC40	分散メモリ, スカラー型システム 全 548 ノード (1096CPU, 19728Core) 総理論演算性能: 662.8TFLOPS 作業データ領域: 200TB (Lustre) ノード構成 CPU: Intel Xeon E5-2695v4 2.1GHz 18Core x2 Memory: 128GB (16GB DDR4-2133 ECC x8)
SGI UV3000	共有メモリ型(ccNUMA 方式)システム 128 nodes, 1536 CPU cores, 32TB memory が ccNUMA 方式により結合され、単一メモリ空間を持つ ノード構成 CPU: Intel Xeon Processor E5-4655v3 x 2 メモリ: 256GB (DDR4-2134MHz x 8) NUMA-link6 によりノードを結合 ディスク装置 51TB

Fujitsu CX250 クラスタ	システム Fujitsu Primergy CX250 S2 全 108nodes, 216CPU, 2160 CPU cores Infiniband FDR 4x によるノード間接続 作業用データ領域 : 50TB, 一部ノードから GPFS による高速 I/O ノード構成 CPU: Intel Xeon E5-2680v2 2.80GHz (10Core) x2 Memory: 64GB (4GB DDR3-1866 ECC x16) ノードメモリバンド幅: 119GB/s 主なソフトウェア: Matlab, Materials Studio, etc.
GPU ノード	全 4nodes, 80CPU cores, 8 GPU ノード構成 CPU : Intel Xeon E5-2680v2 2.8GHz (10core) x2 GPU : Tesla K40 x2 Memory: 64GB 主なソフトウェア,開発環境: CUDA 7.0 cula, PGI Compiler

参考文献

- [1] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究 : 1992 年度-1993 年度”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-94-0001, (1994).
- [2] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究 : 1994 年度-1996 年度”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-97-3, (1997).
- [3] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究(1997 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-98-1, (1998).
- [4] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(1998 年度-2000 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-003, (2002).
- [5] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2001 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-004, (2002).
- [6] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2002 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2003-001, (2003).
- [7] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2003 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2004-002, (2004).
- [8] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2004 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2005-001, (2005).
- [9] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2007”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2008-002, (2008).

- [10] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2008”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2009-001, (2009).
- [11] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2009”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2010-001, (2010).
- [12] 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2010”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2011-001, (2011).
- [13] 佐藤 幸紀, 尾崎 泰助 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2011”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2012-001, (2012).
- [14] 佐藤 幸紀, 尾崎 泰助 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2012”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2013-001, (2013).
- [15] 佐藤 幸紀, 宮下 夏苗, 尾崎 泰助 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2013”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2014-001, (2013).
- [16] 宮下 夏苗, 井口 寧 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2014”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2015-001, (2014).
- [17] 井口 寧, 本郷 研太, 宮下 夏苗(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2015-2016”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2018-001, (2018).

2. 情報科学分野の計算サーバ利用研究

概要

ボードゲームのオセロは通常 8×8 の盤面上でプレイされる. このゲームが先手必勝/後手必勝/引き分けのどれであるかは, 今でもわかっていない. しかし, 盤面の大きさが 6×6 の場合は, 後手必勝であることがわかっている. 本研究では, どの程度の大きさの盤面までなら, 到達可能なすべての局面を全列挙できるかを確かめる研究を行った. つまり, 本研究のゴールは, 解空間の完全解析である. これは先手必勝かどうかを判定する問題よりも計算資源が必要であるが, 現在のスパコンでどの程度の規模まで読み切れるのかという指標を与えてくれる.

まず, 通常の盤面の 8×8 ではなく, それよりひと回り小さい 6×6 の盤面でのオセロの解空間の完全解析に取り組んだが, うまくいかなかった. メモリを極限まで節約するデータ構造を開発したが, その処理に時間がかかり, 完全解析にはおよそ 1500 日必要となることがわかった. そのため盤面のサイズを 5×6 にして再挑戦した. この解空間の完全解析は, 成功し, 解析にかかった時間は約 2 時間だった.

基本的なアルゴリズムは, 単純な幅優先探索である. 各世代のすべての盤面を効率よく管理するデータ構造を開発したことで, メモリ効率はかなり良くなり, 計算途中でのメモリのあふれは回避できた. 結果, 生成された全盤面数は 257,387,474,170 で, すべてがコマで埋まった盤面数は 83,175,694 であった. 後者の盤面の集合から, 文字フォントとして使えるものを拾い出し, オセロフォントと名付けて発表した. 実際に文字フォントとしても使えるが, 一人詰めオセロの問題 (パズル) としても楽しめる. 以下に, 解析で得たフォントを掲載する.



関連発表論文

1) Amanj Khorramian, Tomoko Taniguchi, Takeaki Uno, and Ryuhei Uehara.

Othello Font,

IPSJ SIG Technical Report, 2018-AL-168-2, pp. 1-8, 2018/05/25-2018/05/26. (査読なし)

単位角度で制限された単頂点折り紙の折り畳み方の列挙

先端科学技術研究科 上原研究室 大内 康治

使用計算機: UV3000

概要

折り紙の工学的応用は分野を超えて数多く存在し、人工衛星に搭載する太陽光発電パネルの収納、可動かつ強靱な建材の構成、容易に誘導及び展開が可能な血管拡張用ステントなどがある。本研究が属する分野である計算折り紙は折り紙の理論的背景を明らかにすることを志し、すべての応用を支える様々な基礎的洞察を提供している。しかし、有用な折り紙構造の考案は未だに人間の試行錯誤に依存しており、折り紙構造に関する知識の獲得は重要な課題のひとつである。

本研究では、折り紙構造に関する新たな知見を得ることを目的として、正の偶数 n を入力とし、折り線間の角度を単位角度 $2\pi/n$ の整数倍に制限した時の単頂点折り紙の折り畳み方を列挙した。単頂点折り紙とは、すべての折り線が紙の中心から放射状に配置された折り紙構造である。単頂点折り紙に単位角度を設けた計算モデルは今までにないものであり、その列挙を試みたのも本研究が初めてである。提案手法では、計算効率向上と結果の簡潔さのために、対称性による重複を取り除いている。

提案手法の概要を図 1 に示す。図中の処理(1)と処理(2)以降の間には並列性があり、処理(1)で得た折り線配置について処理(2)を行いながら次の折り線配置を得るために処理(1)を続けることができる。MPI による並列処理の効果は大変大きく、UV3000 の 96 ノードを用いることで 200 倍以上の計算速度を達成し、1 週間かけても $n=32$ の場合(約 2.4×10^{10} 通り)までしか計算できなかったのに対して 5 日間で $n=38$ の場合(約 6.3×10^{12} 通り)を計算できるようになった。

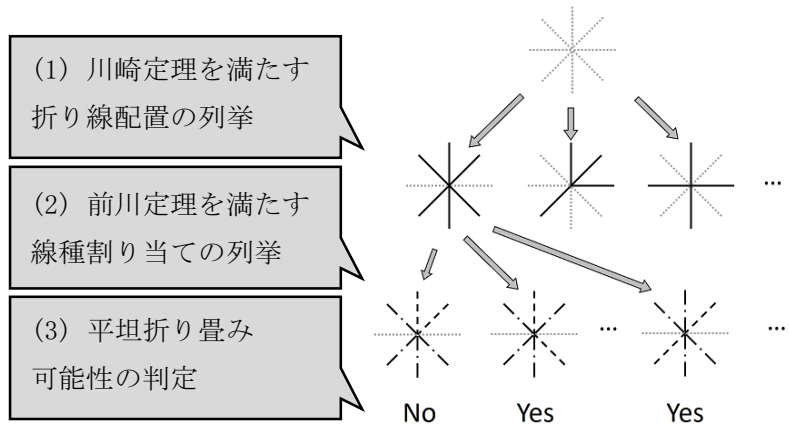


図 1 提案手法の概要($n = 8$).

関連発表論文

- 1) Koji Ouchi and Ryuhei Uehara. Efficient Enumeration of Flat-Foldable Single Vertex Crease Patterns, IEICE Transactions on Information and Systems, 条件つき採録

関連取得研究費

- 1) 平成 29 年度研究拠点形成支援事業萌芽的研究支援 (JAIST 学内支援)

グラフの同型性を考慮した数え上げ

所属・氏名 情報科学系・上原研究室 山崎一明

使用計算機：Cray XC40

概要

情報科学の分野では、ものどもの関係を扱うときに「グラフ」と呼ばれる構造を用いる。グラフは一般性の高い概念で、現実世界の多くのものはグラフを用いて表すことができる。そのため、グラフを扱うアルゴリズムの研究が数多くなされてきた。それら研究の中には、対象とするグラフを一般のグラフではなく、特殊な特徴をもったグラフ、すなわち、何らかのグラフクラスに属するグラフに限定することで効率的な処理を実現したものも多くある。また、そういったアルゴリズムを開発する際には、対象とするグラフ全てを入力としてアルゴリズムに与え、動作を確認したいという需要がある。

そこで本研究では、同型性判定が多項式時間で行えるグラフクラスについて、そのグラフクラスに属する全グラフを一つあたり多項式時間遅延で列挙するアルゴリズムを構成するためのフレームワークを定式化した。また、同型なグラフは本質的に同一なものであると考え、同型なグラフはちょうど1度だけ出力するようにした。更に、設計したフレームワークを Interval Graph というグラフクラスについて適用し、Interval Graph を列挙する具体的なアルゴリズムを構築し、ある程度の頂点数以下の Interval Graph を列挙することに成功した。

続いて、より大きな頂点数の Interval Graph を列挙可能にするためにアルゴリズムを分散化した。分散化した列挙アルゴリズムを XC40 上で実行することで、著しい高速化が達成され、大きいサイズの Interval Graph を用意に列挙可能になった。12 頂点の Interval Graph (約 3.5×10^6 個) を列挙するケースを 36 プロセスで実行したところ、約 35.5 倍の高速化が達成された。

本研究は SC17 (Super Computing 17) JAIST ブースにてポスター展示をしたほか、査読付きの会議である WALCOM 2018 に採択された [1]。

関連発表論文

- [1] Kazuaki Yamazaki, Toshiki Saitoh, Masashi Kiyomi, and Ryuhei Uehara. *Enumeration of Nonisomorphic Interval Graphs and Nonisomorphic Permutation Graphs*, pp. 8–19. 2018. 2018/03/03-05, Dhaka, Bangladesh.

GPU のための疎行列格納方式に対する圧縮率向上スキームに関する研究

情報科学研究科

河村 知記

使用計算機：GPU, XC40

概要

多くの反復法では、sparse matrix-vector multiplication (SpMV) が用いられ、反復法内でも多くの演算時間を費やす処理の 1 つとして知られている。また、演算時間だけでなく、SpMV で用いられる疎行列は反復法の使用メモリ量の多くを占める。このため、反復法の高速化のために SpMV の高速化、省メモリ化は必須である。近年、Graphics Processing Units (GPUs) は多くの演算コアを備えていることから、描画処理だけでなく、汎用処理の並列計算にも用いられるようになった。SpMV は高い並列度での並列計算が可能であることから、GPU による SpMV の高速化に関する研究も盛んにおこなわれている。しかしながら、GPU メモリ CPU メモリのメモリ空間が異なることが、SpMV の高速化の問題となる。一般的に GPU を用いて SpMV を演算する際には、SpMV に必要なデータを CPU メモリから GPU メモリへ転送し、演算を行う必要がある。そのため、CPU メモリに用意してある疎行列データのサイズが GPU メモリのサイズより大きな場合、一度に GPU メモリへデータを格納することができない。もし一度に格納しきれない場合には、CPU メモリと GPU メモリのデータの入れ替えが必要となる。この CPU メモリと GPU メモリ間のデータ転送は GPU コンピューティングにおける最もボトルネックとなる処理のひとつであり、高速化の妨げとなる。この問題は数値シミュレーションの規模がさらに巨大化することで、さらに顕著になると考えられる。NVIDIA の GPU メモリは大きなもので 16GB となっており、CPU メモリのサイズに比べると、少ない傾向にある。これらの理由から、疎行列のデータを少ないメモリ量で格納する方法が必要となる。

記した問題点を解決するため、本研究では疎行列格納方式に対する圧縮率向上スキーム (RBP 法) を提案する。SpMV で使用される疎行列には、演算に必要な要素 (値が 0 の要素) が多く存在している。SpMV に必要となる非ゼロ要素のみを疎行列から取り出し、SpMV で使用することが、メモリ使用量削減のために重要である。これまでに疎行列内の非ゼロ要素のみを効率良く格納するための疎行列格納方式が提案されてきた。しかしながら、これまでの疎行列格納方式では疎行列内の非ゼロ要素の規則性を考慮していない。この規則性を考慮することで、さらに疎行列のメモリ使用量の削減が可能である。本提案圧縮方式 (RBP-CSR, RBP-ELL, RBP-ELL-R) では、疎行列の非ゼロ要素の規則性を考慮し、疎行列格納方式内の連続した非ゼロ要素の情報に関して削減を行う。評価実験において、本提案圧縮方式は、10 個中 8 個の疎行列において、最大 35.1% の疎行列格納方式のメモリ使用量の削減に成功した。演算時間についても、10 個中 7 個以上の疎行列において高速化を達成した。

また、共同研究として反復法内の部分クリロフ空間のサイズを縮小することで、メモリ使用量の削減の検討も行っている。その中で、XC40 を用いて、提案された反復法の並列化を行い、反復法のメモリ使用量と演算性能の評価を行っている。

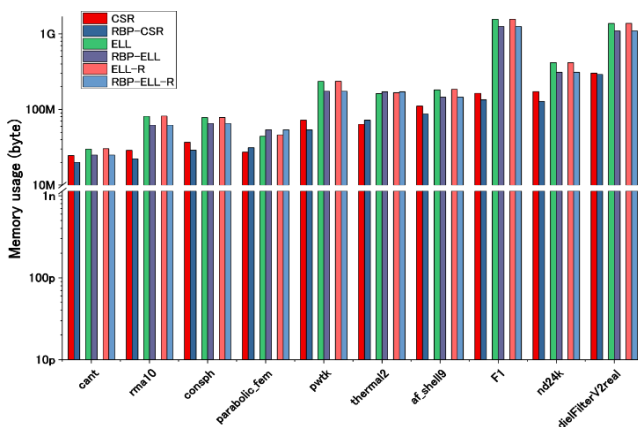


Figure 1 Memory Usage

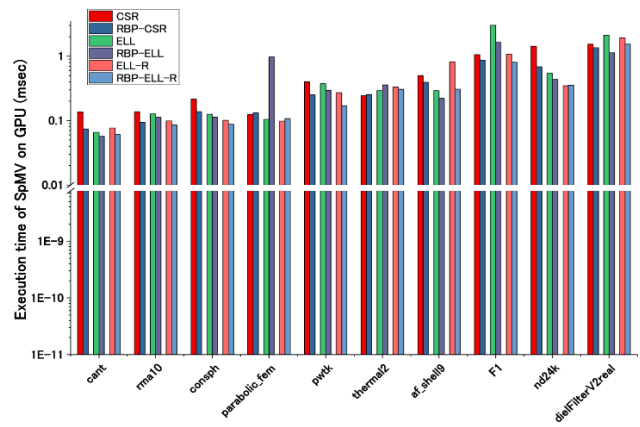


Figure 2 Execution time of SpMV

第一原理計算による物質科学シミュレーション

所属・氏名 情報社会基盤研究センター 本郷研太
使用計算機: Altix UV3000、CX250、XC40

今年度は、分子二量体の結合曲線を第一原理算定し (Altix UV3000 を使用)、その漸近的挙動からハマカー一定数を算出する枠組みを開発し、原著論文として報告した (研究業績 2)。当該研究成果で得られた知見は、巨視的濡れ性現象における局所構造ナノモデリングの概念へと発展し、微視的な局所構造から濡れ性現象を解明することを目的とする研究プロジェクトの立案に繋がり、科研費若手(B)の獲得に至った。また、本学計算機を利用すれば、計算機資源の制約から他の研究グループでは実施の難しい大規模第一原理計算の実施も可能であり、多数の共同研究につながった: 新学術領域の支援を受け、複合アニオン化合物の第一原理計算 (密度汎関数計算、フォノン計算) を実施し (CX250/XC40 を使用)、実験研究との共同研究を多数実施している (研究業績 3/4)。また、ケニアの研究グループとの国際共同研究として、ダイヤモンドパワー半導体の電極探索 (AltixUV3000 を使用) を行った (研究業績 5)。

研究業績(原著論文・査読あり)

- 1) T. Ichiba, Z. Hou, K. Hongo, R. Maezono, “New Insight into the Ground State of FePc: A Diffusion Monte Carlo Study”, *Sci. Rep.* 2017, 7, 2011.
- 2) K. Hongo and R. Maezono, “A Computational Scheme To Evaluate Hamaker Constants of Molecules with Practical Size and Anisotropy”, *J. Chem. Theory Comput.* 2017, 13, 5217–5230.
- 3) K. Nakano, K. Hongo, and R. Maezono, “Investigation into Structural Phase Transitions in Layered Titanium-Oxypnictides by a Computational Phonon Analysis”, *Inorg. Chem.* 2017, 56, 13732–13740.
- 4) D. Kato, K. Hongo, R. Maezono, M. Higashi, H. Kunioku, M. Yabuuchi, H. Suzuki, H. Okajima, C. Zhong, K. Nakano, R. Abe, and H. Kageyama, “Valence Band Engineering of Layered Bismuth Oxyhalides toward Stable Visible-Light Water Splitting: Madelung Site Potential Analysis”, *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 18725–18731.
- 5) T. Ichibha, K. Hongo, I. Motochi, N.W. Makau, G.O. Amolo, and R. Maezono, “Adhesion of Electrodes on Diamond (111) Surface: A DFT Study”, *Diamond & Related Materials* 2018, 81, 168–175.

研究費獲得実績

- 1) 平成 29 年度科研費・若手研究 (B)、「半導体液体プロセスにおける微視的濡れ性制御: 計算科学的アプローチ (研究代表/15K21023)」、H29 年度 1,700 千円 (H27 年 4 月～H29 年 3 月)。
- 2) 平成 28 年度新学術領域 (研究領域提案型)、「複合アニオン化合物の創製: 物質合成と設計指針の確立 (研究分担/研究代表者: 荻野拓/16H06439)」、H29 年度 2,700 千円 (H28 年 8 月～H33 年 3 月)。
- 3) 平成 27 年度科研費・基盤研究(B)、「バイズ統計と量子化学を基盤とする新薬候補分子の探索 (研究分担/研究代表者: 吉田亮/15H02672)」、H29 年度 200 千円 (H27 年 4 月～H31 年 3 月)。
- 4) 平成 28 年度戦略的創研究推進事業さきがけ(個人型研究)、「バイズ事後分布を探索重みに活用した物質構探索の予測性向上 (研究代表/JPMJPR16NA)」、H29 年度 10,500 千円 (H28 年 10 月～H32 年 3 月)。

ACTIVITY REPORT OF FY2016

Ryo Maezono/Assoc. Prof./Information Science

The Investigation of Hydrodeoxygenation (HDO) and Decarbonylation (DCO) Process of Methyl Butanoate on NiMoS Surfaces: Ab Initio Study

Collaboration with Institut Teknologi Bandung, Indonesia

One of the main problem in palm oil refineries conversion to biofuel is to calculate the optimized reaction pathways. The reaction pathways are divided into two ways: decarbonylation (DCO) and hydrodeoxygenation (HDO). If both of the processes can be determined the production of palm oil based biofuel with a higher cetane number than that of fossil fuel might be a realizable process. This is a very complex interaction and to uncover the physical phenomena responsible for the interaction is a real challenge. The basic information needed to do so are:

1. Information of the reaction pathways connecting the reactant and product. Question to be answered here is how much activation energy required for each elementary reaction.
2. Catalyst material used to increase the rate of these reactions. The main problem here is the selectivity of catalyst materials that can facilitate the desired reaction pathways. Selectivity becomes an important issue because it is directly related to the efficiency of the reaction and the minimization of the unwanted products.

The purpose of this research is to answer two questions above in the context of the formation reaction of palm oil based biofuel; namely HDO and DCO reactions. In this research, we use transition metal sulfide catalysts such as MoS₂ phase promoted by nickel. It is because NiMoS is known to be selective for the refineries process. Numerous experimentals and theoretical works have provided atomistic descriptions of the NiMoS active phases. Although some experimental investigations on NiMoS active phase had been conducted in the recent years, however some problems remain unresolved. The density functional theory (DFT) based on ab initio computational method will be used to simulate all possible reactions via calculating the activation energy at the elementary reaction and then screening against various selective catalyst candidates. Computational methods have been selected for this research because it can save time and cost when compared with the experimental method which for now still relies on trial and error. This method also allows us to reveal in detail the processes that take place at the atomic level that are often difficult to access experimentally.

This research will be performed in three step;

1. Investigation surface interaction between Methyl Butanoate (C₅H₁₀O₂), Hydrogen (H₂) and NiMoS surfaces. The purpose of this investigation is to find the active site of the molecules on the surface and also to know the effect of H₂ molecules on the Methyl Butanoate adsorption process.
2. Investigation of HDO process. The purpose of this research is to know the elementary reaction pathways of the HDO process.
3. Investigation of DCO process. The purpose of this research is to know the elementary reaction pathways of the DCO process.

GAN Bandgap Calculation Using QMC

Collaboration with IIT Guwahati, INDIA

We studied bandgap of Group 3 Nitrides (AlN, GaN, and InN) using Quantum Monte Carlo methods motivated by their many possible applications in semiconductor industry especially GaN. After encouraging preliminary results using large core approximation of electrons, we decided to further study GaN using small core size such that number of valence electrons in study increased significantly (which also means higher computational resources required).

The result from first run is very promising when compared to experimental results. Currently we are investigating GaN with even lower time-step which will allow us to further extrapolate to ideal time step of 0 which cannot be directly computed with finite computation resources.

This study will lead to :

- 1) First QMC study of Group3 Nitrides in existing literature.
- 2) Comparison with other computational methods (most importantly DFT) for Nitrides which are known to have certain limitations/shortcomings.
- 3) Understanding of how semicore electron influence bandgap calculation in Group 3 Nitrides as well as associated computational cost with DMC which will be indicative of performance of DMC as a general QMC tool .

DMC study of TiO₂

Collaboration with hahid Bahonar university of Kerman, Kerman, Iran

Among transition metal oxides, Titanium dioxide (TiO₂) is a widely used material with many applications as photocatalyst, in solar cells for the production of hydrogen and electric energy, as gas sensor and so on. In addition, its unique properties in the form of nanoparticles such as high photocatalytic activity due to its large surface area has made it in top of researches. In particular, TiO₂ nanotube has received more attention. On the other hand, it is reported that TiO₂ nanotube have a band gap slightly larger than those of bulk structure. Therefore, it is attempted to narrow the band gap to improve the TiO₂ nanotube functionality. Doping is one of the methods which can be referred. Usually, noble metal nanoparticles are used since they show high catalytic activity. However, they are expensive and rare. So, the use of non-noble metal catalyst having high activity is of considerable attention. Copper (Cu) based materials are getting more attention since they are abundant, have relatively low cost, and great catalytic activity.

In the present work, it is desired to investigate the structural and electrical properties of Cu-doped TiO₂ nanotube in the framework of density functional theory (DFT) using plane wave pseudopotential method within PBE+U functional as implemented in Quantum ESPRESSO package. On the other hand, regarding the unique properties of TiO₂, having information about its surface and the way of improving its operation is of great interest. It usually shows wide applications in fields such as photocatalysts, hydrophilic films and gas sensors. Meanwhile, it is shown that surface modification of TiO₂ is one of the effective methods to improve its performance. In many cases, (110) surface of rutile TiO₂ is used as a model substrate. Here, ab initio investigation of H-doped rutile TiO₂ is preferred using Quantum ESPRESSO package within PBE+U functional and plane wave pseudopotential method.

Investigation of TiO₂ surface reactivity

Collaboration with University College London, UK

Materials of the composition SiO_x-TiO₂ ($0 \leq x \leq 2$) are of particular interest for many technologies such as catalysis¹, gas sensing² or water splitting³. Many applications rely heavily on its surface properties and a good understanding of its surface electronic structure is crucial to build new and improved technologies. TiO₂ is often used as a photocatalyst, be it for self-cleaning glasses, water purification or hydrogen production. Thus a great amount of research has been conducted investigating the interaction of water with TiO₂ surfaces.⁴ The formation of Si-O-Ti bonds alters the electronic structure of the surface leading to unique catalytic properties while maintaining high thermal and chemical stability.

TiO₂ displays superhydrophilic behaviour under UV irradiation. This is commonly attributed to the generation of electron hole pairs and the charge carriers contribute to the oxidation of molecules on the surface and the formation of hydroxyl groups is linked to a reduction in the water contact angle. Addition of silica may increase the photocatalytic activity if the two substrates are in close contact. In fact it has been reported that incorporation of SiO₂ into TiO₂ films will lead to a reduction in the water contact angle.⁵ Depositing SiO_x on the TiO₂ (110) surface in air leads to monolayer growth, nucleating at step edges and kink sites. Deposition in vacuum results in a much rougher surface. In both cases the wettability of the surface is reduced. Despite many experimental studies, theoretical work of SiO_x on TiO₂ surfaces is still rare.

Previously we modelled a clean rutile TiO₂ (110) surface and its interactions with SiO as well as SiO₂. The adsorption of single molecules indicated an epitaxial growth of SiO on TiO₂. However, Rutile TiO₂ is readily reduced during annealing at 1000°C forming surface oxygen vacancies and interstitial Titanium. Therefore we investigated the adsorption of SiO and SiO₂ at an oxygen vacancy on the surface, elucidating on the structure formed by these compounds upon adsorption.

In a next step we want to continue our work on this system working towards understanding experimental data of epitaxially grown films of SiO_x on TiO₂. At high vacuum and high annealing temperatures the rutile TiO₂ (110) surface may also reconstruct and we intend to model the adsorption of siliconoxide molecules on a reconstructed surface. In a next step we will move from modelling individual molecules to thin film overlayers. This will build a basis for investigating the interaction of H₂O with such a surface.

Anharmonic Calculations in Hybrid Perovskite Solar Cells

Collaboration with Cambridge University, UK

We are conducting large-scale calculations including anharmonic vibrational effects on hybrid organic-inorganic perovskite systems. These systems have great potential as solar cell materials, but are not yet fully understood. Our calculations aim to study the effect of the motion of the organic molecule contained within the perovskite lattice on the electronic band structure. This is important as the band structure directly affects these materials' use in solar cells. It is hoped that by understanding these systems better we can move towards using them in practical circumstances as solar cells.

TDDFT study of cage clusters

Collaboration with University of Yaounde I, Cameroon

Fullerenes C_n (n being the number of carbon atoms) are allotropes of carbon that possess the particularity to form empty hollow cages, wide enough to accommodate atomic systems A of small size, to form complexes A@C_n. This property of encapsulating systems make them to be good candidates for

interesting applications. Indeed they are predicted to be used as enrollment for drugs pinpoint delivery to cure cancers for example, or to constitute traps for virus in medicine, and in electronics, they would be used as building tools for quantum computers. These kinds of applications require a good knowledge of the way the cage and the confined system interact together, how isolated the encapsulated system is in the cage and which modifications on the properties of the cage arise from the presence of the dopant system. How does the presence of the atoms modified the static and dynamical properties of C60 cage? Is there any similarity in the behavior of these properties according to the type (centered or off-centered) of confined atom? How well can the presence of the atom and its type can be notice while studying external excitation by electron energy lost? How all those results are linked together? This project intends to study those questions.

Quantum Monte Carlo study of the energetics of rutile, anatase, brookite, and columbite TiO₂ polymorphs

Collaboration with Cambridge University, UK

Titanium dioxide (TiO₂) is a technologically preeminent material, which is used in photovoltaics, photocatalysis, and as a catalyst support. Despite its technological relevance, its fundamental properties are not fully understood: it is not even known what is the most stable structure of TiO₂. In this project, we study four types of TiO₂, the rutile, anatase, brookite, and columbite polymorphs, using state of the art computational methods. We use quantum Monte Carlo to describe the electrons and density functional theory to describe the atomic quantum and thermal motion, fully incorporating the effects of anharmonicity. Our calculations allow us to construct the most accurate phase diagram of this important material to date, predicting that at low temperatures the anatase structure is the most stable structure, but the rutile structure is stabilized above about 630 K.

[1] J. Trail, B. Monserrat, P. Lopez Rios, R. Maezono, and R.J. Needs, Physical Review B, in press.

THE EFFECTS OF GRAPHENE AND Ag-NANOFLOWERS FORMATION AS A FLEXIBLE SERS SUBSTRATE

Apichai Jomphoak/CNL, NECTEC and Ryo Maezono/School of Information Science, JAIST

E-mail: mwkapj1401@icloud.com

Abstract:

The formation of Ag-nanoflowers (AgNFs), flower-like silver structures, was experimentally fabricated on graphene monolayer to be proposedly used as a stable flexible surface-enhanced Raman scattering (SERS) substrate for ultra-sensitive, reproducible, and consistent detection [1]. The agglomeration of Ag nanoparticles were initially deposited on prepared graphene surface that cause the formation process into flower-like structure on the graphene substrate. Hence on the surface of this SERS substrate, graphene was employed not only to upkeep the uniform distribution of AgNFs growth for enhancement aspect but also to prevent the oxidation of atmospheric exposure. In this work, we investigated the formation, total energy, and stability of the graphene/AgNFs using density functional theory (DFT) to simulate the absorption characteristics of their structure on graphene monolayer. The computational results will be compared with the observed ones from scanning electron microscope (SEM) and Raman spectroscopy. This high efficiency but low cost flexible SERS substrate would intendedly target to deliver a novel system for the molecular trace-detection in environmental protection and food safety.

REFERENCES:

[1] K-S. Lee and M.A. El-Sayed. *J Phys Chem B* 110(39):19220 (2006).

A Post-Hartree-Fock, DMC and DFT Calculation for Energy to linearisation and their trends for Disiloxane

Guo Chao, Prof. Ryo Maezono/School of Information science, Assoc Prof. Kenta Hongo/ RCACI

School of Information science.

PROJECT DESCRIPTION:

The disiloxane molecule, disilylether($\text{H}_3\text{Si-O-SiH}_3$), is the simplest molecule containing the Si-O-Si linkage, characteristic for silicates and related material of industrial importance.¹ Achieving energy to linearise the Si-O-Si bond is experimentally difficult due to small amount of energy required in the process. We studied the linearisation energy (LE) of disiloxane, with *ab initio* calculation on the CCSD(T) level of theory, Density functional theory (DFT) and using Fixed-Node Diffusion Quantum Monte Carlo Method (FN-DMC). The most commonly used "hybrid" functional B3LYP is adopted for DFT calculation and single Slater-Jastrow wave function is adopted as trial wave function for Quantum Monte Carlo calculations. Our results show variation of computed values from DMC with DFT and CCSD(T) level of theory. DFT calculations using B3LYP and CCSD(T) level of theory for increasing basis sets tend to converge to particular value with nearly constant difference.

We calculated the barrier to linearisation using 3 levels of theory including Monte Carlo Methods of DMC and using 9 different basis sets for fixed confirmations and calculated the energy to linearisation. It is difficult to determine the exact barrier to linearisation. We conclude from the results that basis set 6-311G(3df) and cc-pVQZ yield results that are similar for all three levels of theory. Increasing basis sets beyond 6-311G(3df) yield similar values for barrier to linearisation for CCSD(T) and DFT calculations. These two values further differ by a nearly constant value of 0.3-0.4 kcal/mol. Calculations further demonstrate that using polarized functions in basis sets reduces the difference in results while using diffuse functions broadens it. The results further indicate that the barrier to linearisation is dependent to change is basis set and level of theory used. Purely Polarized functions give the best results consistent with all three levels of theory. It may also be noted that some DFT calculations are very close agreement with our CCSD(T) results.

Reference:

- [1] Newton, M. D.; Gibbs, G. V. *Physics and Chemistry of Minerals* 1980, 6, 221–246.
- [2] Drummond, N.; Towler, M.; Needs, R. *Physical Review B* 2004, 70, 235119.

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1] 'A Post-Hartree-Fock, DMC and DFT Calculation for Energy to linearisation and their trends for Disiloxane', Guokaku Chao, Ichiba Tom ,R. Maezono,K. Hongo, *Jour. Am. Chem. Soc.*

Machines:

Altix [Gaussian,CASINO]
CX250 [Gaussian]
VPCC [Gaussian]

Scalable dynamic locality-sensitive hashing for Structured dataset on Main memory and GPGPU memory

Toan Nguyen Mau

computer: pcc.jaist.ac.jp user: s1620409@jaist.ac.jp

Index Terms—Locality-sensitive hashing, Structured dataset, GPGPU Memory, Similarity Searching, Parallel Processing

Locality-sensitive hashing (LSH) is a significant algorithm for big-data hashing. The original LSH uses a static hash-table as a reduce mapping for the data. Which make LSH challenging to apply on real-time information retrieval system. The database of a real-time system needs to be scalably updated over time. In this research, we concentrate on increasing the accuracy, searching speed and throughput of the nearest neighbor searching problem on big dynamic database [1].

A. Locality-sensitive hashing (LSH)

LSH is a well-known algorithm to handle the ϵ -NNS problem which uses approximate nearest neighbor. LSH divides the data into multiple buckets, the number of hash function in hash family function will indicate the number of buckets in system. Vectors/points in the same buckets will be similar to each other because of the continuity of the selection of hash functions. Therefore, instead of computing the similarity of the input vector with all of the vectors in database, we need to compare the query with the vectors in several buckets.

B. Dynamic Locality-sensitive hashing (DLSH)

Data will be stored as a sequence that indicated by an hash-value on LSH. We proposed to used linked-list structure to track all the data in a bucket. An important part of hashing table of DSLH is the pointers of all available buckets. To handle this issues, in the first part of hash-table array, we store the static pointers for every bucket by the hash values.

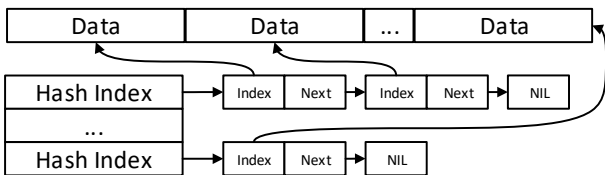


Fig. 1. Linked-list bucket structure of DSLH

Fig. 1 shows the static Hashing Index part correspondings with hashing values of family of hash function. The value of each Hash Index will point to its first index of data. the cell of bucket linked-list contains two important values the

address of the data/item and the pointer of the continues cell. The NIL cell is a special cell that denotes the ending of a bucket. In case of a bucket is empty the pointer to the first cell will be set to NIL.

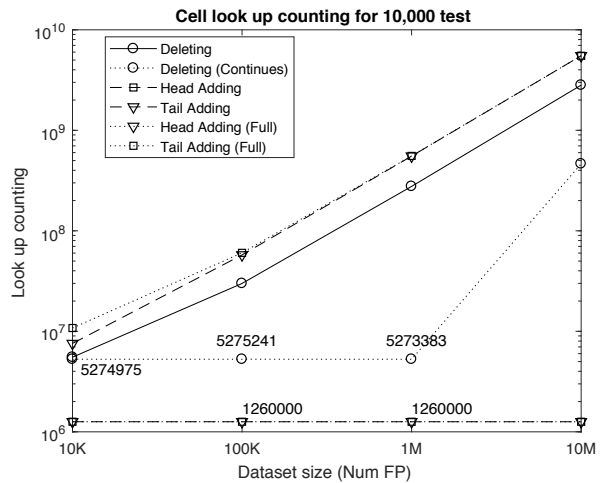


Fig. 2. Number of lookup in hash-table of DSLH; (Full): Adding the data/item when the hash-table is full; (Continues):

The performance of DSLH over the data size is shown in Fig. 2. We deployed tests on various dataset size with 19 hash functions. The number of hash-table lookup of deleting and adding commands is depended to the average number of cell in the bucket. When continues deleting data/item from the dataset, the number of hash-table lookups will be reduced. Adding the item/date at the head of linked-list is recommended for getting performance. However, this approach is easier to make the database fragment.

C. Conclusion

The dynamic structure needs extra memory space for holding the pointers of hash-table's cell and addressing to the dataset. However, the performance of DSLH is acceptable for a dynamic system comparing to the performance of the original LSH. The DSLH can reuse the space in main memory or GPGPU memory. Although it still takes time to find the exact memory address.

REFERENCES

- [1] William Bruce Frakes and Ricardo Baeza-Yates. *Information retrieval: Data structures & algorithms*, volume 331. prentice Hall Englewood Cliffs, NJ, 1992.

MOLECULAR INTERACTIONS IN INCLUSION OF COMPLEXES WITH CYCLODEXTRINS

Ornin Srihakulung, Kenta Hongo/*RCACI*, and Ryo Maezono/*School of Information Science, JAIST*
E-mail: mwkons1501@icloud.com

Abstract:

Most case studies of Thai traditional drugs (herbal products) have shown a similar problem of the substance degradation that can cause the instability in the active compounds, including Plumbagin. Basically, encapsulation technique is adopted to address this problem and widely employed to improve the stability of numerous compounds in diverse industries. Binding energy is an important value in the inter-molecular interaction between host and guest molecules, that can directly affect the drug efficiency from the release of active compound to the target cell. *Ab initio* investigation of the binding energy is an important tool to provide useful theoretical predictions. Density Functional Theory (DFT) is most suited to do this. However, its dependence on the exchange-correlation (XC) functionals means that it is necessary to assess the strengths and weaknesses of these functionals for the relevant system. This is the main objective of this study.

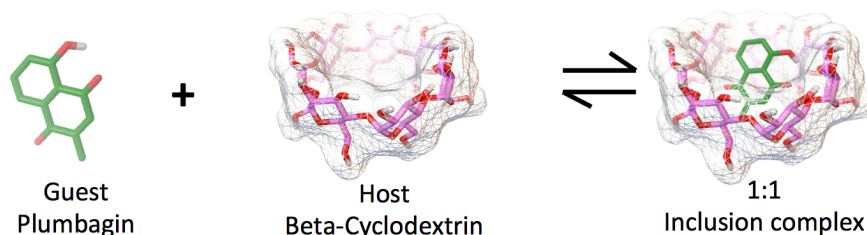


Figure 1. Molecular structure of guest molecule (Plumbagin) and host molecule (β -cyclodextrin), which will form 1:1 inclusion complex

To consider the molecular and organic system, B3LYP functional is generally viewed as the most suitable XC functional [1]. However, it is unable to properly account for inter-molecular interaction, of which dispersion forces (and therefore, dispersion-corrected functionals) is a vital part. A total of five dispersion-corrected functionals were assessed in this study: CAM-B3LYP, B3LYP-GD3, CAM-B3LYP-GD3, M06-2X, and M06-2X-GD3. The conventional hybrid DFT (B3LYP) provides positive binding energy, which means it cannot capture the dispersion force from an inter-molecular interaction [2]. Dispersion correction functionals, meanwhile, give negative values of binding energy, with DFT-GD3 providing the precise and lowest binding energies. These *ab initio* results are compared also with those of semi-empirical methods. Of these, the PM7 method presents the lowest binding energy, though we observe significant overestimations [3].

Reference:

[1] Tirado-rives, J., & Jorgensen, W. L. (2008). Performance of B3LYP Density Functional Methods for a Large Set of Organic Molecules, 297–306. <https://doi.org/10.1021/ct700248k>

[2] Kruse, H., & Grimme, S. (2012). A geometrical correction for the inter- and intra molecular basis set superposition error in Hartree-Fock and density functional theory calculations for large systems A geometrical correction for the inter- and intra-molecular basis set superposition error in Hartree-Fock and density functional theory, 154101. <https://doi.org/10.1063/1.3700154>

[3] R. Sure & Grimme, S. (2015). Comprehensive Benchmark of Association (Free) Energies of Realistic Host-Guest Complexes, *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 11, no. 8, 3785–3801. –

Achievement:

[1] O. Srihakulung, L. Lawtrakul, P. Toochinda, W. Kongprawechnon, A. Intarapanich, and R. Maezono, Theoretical investigation of molecular calculations on inclusion complexes of plumbagin with β -cyclodextrins, in 2017 Fourth Asian Conference on Defence Technology - Japan (ACDT), 2017, pp. 1-5.

[2] O. Srihakulung, R. Maezono, P. Toochinda, W. Kongprawechnon, A. Intarapanich, and L. Lawtrakul, Host-Guest Interactions of Plumbagin with β -Cyclodextrin, Dimethyl- β -Cyclodextrin–and Hydroxypropyl- β -Cyclodextrin: Semi-Empirical Quantum Mechanical PM6 and PM7 Methods, *Sci. Pharm.* 2018, 86(2), 20; <https://doi.org/10.3390/scipharm86020020>

Machines:

CX250 [Gaussian, GaussView]

Altix [Gaussian]

VPCC [Gaussian]

A New *Ab Initio* Modeling Scheme for Ion Self-diffusion Coefficient Applied to ϵ -Cu₃Sn Phase of Cu-Sn alloy

Tom Ichibha / School of Information Science, JAIST

Genki Prayogo / School of Materials Science, JAIST

Assoc. Prof. Kenta Hongo / Research Center for Advanced Computing Infrastructure, JAIST

Prof. Ryo Maezono / School of Information Science, JAIST

Abstract

本研究では、拡散経路に沿ったイオンジャンプのエネルギー障壁をはじめとする、第一原理計算から算定可能な物理量を、拡散係数評価に結びつける新たな方策を確立した。具体的には、算定された障壁エネルギー予見に応じて、所与の拡散ネットワークをドメインに分割し、その中でさらに空孔の飛び移り頻度の高い一連のサイトをまとめて一つの代表サイトに置換することで問題を単純化し、拡散係数を評価する解析的モデルの確立を実現する。本研究で実際に取り扱ったのは ϵ -Cu₃Sn 合金である。Cu-Sn 系無鉛ハンダを Cu 基盤上での接合に用いた際に、当該合金層が接合面付近に形成されるが、その内部におけるカーケンダルボイドの発生が接合を弱体化させるものと考えられていることから、当該合金中のイオン自己拡散が良く調べられている。確立したモデルに基づき算定した自己拡散係数は先行実験値を良く再現した。エネルギー障壁の算定には多数の第一原理力場計算が必要であり、本学計算機ファシリティを活用した。

List of Publications:

- [1] T. Ichibha, G. Prayogo, K.Hongo, and R.Maezono, arXiv:1804.02535 (2018). [arXiv]
- [2] T. Ichibha, G. Prayogo, K. Hongo and R. Maezono, "A New Ion Diffusion Model Applied to Lead-free Solder", APS March Meeting 2018, V31.00014, Los Angeles Convention Center, CA, USA, 2018/03/08. [口頭発表/査読無]
- [3] T. Ichibha, G. Prayogo, and R. Maezono, "New Model of Ion Migration for ϵ -Cu₃Sn", The Towler Institute, Vallico Sotto, Tuscany, Italy, 2017/08/02. [ポスター/査読有]

List of Planned Publications:

- [1] T. Ichibha, G. Prayogo, K.Hongo, and R.Maezono. [原著/ Phys. Rev. Lett.へ投稿予定]

Comparison of Post Analyses of Quantum Monte Carlo Calculations

Tom Ichibha / School of Information Science, JAIST
Assoc. Prof. Kenta Hongo / Research Center for Advanced Computing Infrastructure, JAIST
Prof. Ryo Maezono / School of Information Science, JAIST
Dr. A.J.W. Thom / Department of Chemistry, University of Cambridge

Abstract

量子モンテカルロ法は、分子や結晶のエネルギー的安定性を、非常に高い精度で評価することができる、第一原理計算手法である。シミュレーション時間ステップ毎にエネルギー推定値をサンプルし、その定常領域での平均値としてエネルギーを評価する（図 1）。したがって、エネルギー評価値は統計的誤差を伴うが、その評価は容易ではない。何故ならば、各サンプルは統計的に互いに独立ではないため、相関時間を考慮した誤差の見積もりが要求されるためである。本研究では、QMC 界限、または、応用数学分野で普及している、3つの解析手法を QMC の計算結果に適用し、性能比較を行った。加えて、応用数学分野で確立されている、定常領域の始点決定アルゴリズムが量子モンテカルロ法の出力に対しても良く働くことを明らかにした。性能比較では、多数のサンプル列に対して解析を適用し、統計的に性能を評価する必要がある。応用数学分野の先行研究に倣い、1000個の異なる乱数種に対してエネルギー時系列を生成し、これを性能比較に用いた。上記の計算には本学計算機リソースを活用した。

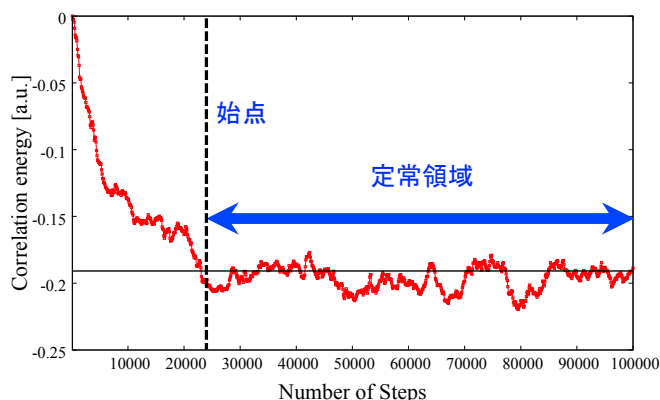


図 1: QMC 計算から得られたエネルギー時系列。シミュレーション時間ステップが進むにつれて、波動関数の変分最適化が進み、エネルギー推定値が低くなる。変分最適化が十分に為されたところでエネルギー推定値は一定値に収束し、ここでの平均値としてエネルギーを推定する。

List of Planned Publications:

- [1] T. Ichibha, K. Hongo, R. Maezono, and AJW Thom, "Post Analyses of QMC Markov Chains Revisited", CECAM E-CAM workshop "Improving the accuracy of ab-initio predictions for materials", Paris, France, 2018/09. [口頭発表/査読有]
- [2] T. Ichibha, K. Hongo, R. Maezono, and AJW Thom, [原著/Phys. Rev. B へ投稿予定]

Very Fast Diffusion of Ti Interstitial Defect in [001] Direction in Bulk Rutile TiO₂: A Diffusion Monte Carlo Study

Tom Ichibha / School of Information Science, JAIST
Dr. Anouar Benali / Argonne National Laboratory
Assoc. Prof. Kenta Hongo / Research Center for Advanced Computing Infrastructure, JAIST
Prof. Ryo Maezono / School of Information Science, JAIST

Abstract

二酸化チタンは、光触媒や太陽光電池などへの応用で優れたエネルギー変換効率を実現するなど、近年、最も注目度の高い材料の一つである。当該系表面における酸素空孔欠陥/チタン間隙欠陥の拡散は、電荷輸送や欠陥密度変化に伴う表面物性の変化と密接に関係し、そのため実験/第一原理計算の両面から精力的に調べられている。しかしながら、固体中でどちらが早く拡散するかすら結論が得られていない。本研究では、量子拡散モンテカルロ法から当該問題に挑む。当該手法は、第一原理計算の中でも随一の予見信頼性を誇る反面、大量の計算機リソースを必要とし、本学の計算機ファシリティを活用した。図1に設定した各拡散経路に沿ったイオンジャンプの障壁エネルギーを当該手法から評価し、Ti 間隙欠陥の方が早く拡散することを明らかにした。加えて、面白いことに、Ti 間隙欠陥は、*c* 軸方向に極めて早く拡散するという、インパクトのある新奇的な予見結果を得ている。

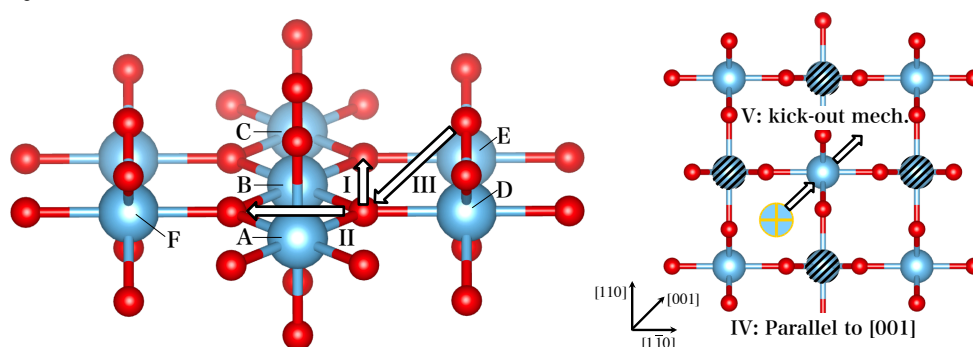


図1; 左図、右図はそれぞれ酸素空孔欠陥、チタン間隙欠陥の拡散経路を図示したものである。大玉はチタンイオン、小玉は酸素イオンである。経路IVはキックオフ機構と呼ばれるものであり、チタン間隙欠陥が正規サイトにあるチタンイオンを別の間隙欠陥サイトに押し出し、自身はその正規サイトに収まることで、結果的に間隙欠陥が移動する。

List of Planned Publications:

[1] T. Ichibha, A. Benali, K. Hongo, and R. Maezono. [原著/投稿先未定]

Hydrogen Crystal Phase Diagram Updated by Quantum Monte Carlo and Anharmonic Phonon Calculations

Tom Ichibha / School of Information Science, JAIST
Dr. Yunwei Zhang / College of Physics, Jilin University
Dr. Anouar Benali / Argonne National Laboratory
Assoc. Prof. Kenta Hongo / Research Center for Advanced Computing Infrastructure, JAIST
Prof. Ryo Maezono / School of Information Science, JAIST
Prof. Yanming Ma / College of Physics, Jilin University

Abstract

We studied the phase diagram of hydrogen crystal above 400 GPa with diffusion Monte Carlo method. For the system, the metal-insulator transition is observed at 450 GPa experimentally. The transition pressure is reproduced by the recent simulation, but it is apparently brought by adjusting the geometries to eliminate the bias from few anharmonicity considered in the phonon calculation. Our work successfully reproduced the transition pressure without any adjustment, considering the anharmonicity for zero-point vibration with vibrational self-consistent field method. At the same time, the phase diagram is changed not only qualitatively but also quantitatively. Another issue for the system is that the most promising candidate structure of the metallic phase does not reproduce the experimental Raman spectrum. We also found a new structure that reproduces the experimental spectrum quite reasonably using particle swarm optimization method.

List of Planned Publications:

[1] T. Ichibha, Y. Zhang, A. Benali, K. Hongo, R. Maezono, and Y. Ma. [原著/投稿先未定]

Adhesion of electrodes on diamond (111) surface: A DFT study

Tom Ichibha / School of Information Science, JAIST

Assoc. Prof. Kenta Hongo / Research Center for Advanced Computing Infrastructure, JAIST

Dr. I. Motochi / Department of Mathematics and Physical Sciences, Maasai Mara University

Prof. N.W. Makau / Computational Materials Science Group, Department of Physics, University of Eldoret

Prof. G.O. Amolo / Department of Physics and Space Science, The Technical University of Kenya

Prof. Ryo Maezono / School of Information Science, JAIST

Abstract

ダイヤモンド半導体は、高い熱伝導性と広いバンドギャップから、耐電圧性・耐熱性に優れる次世代電力用半導体素子として期待されている。デバイス実用化に必要な低接触抵抗・高接合強度を実現する電極開発が課題の1つとされており、金をはじめ、パラジウム、チタン、モリブデンといった金属電極の接触抵抗が調べられている。本研究では20種類の異なる金属種のシートを、終端処理の異なるダイヤモンド表面（酸素終端/水素終端/終端無し）に接合させたときの接合強度予見と電気的特性評価を第一原理計算から与えた。接合強度は単位面積当たりの界面エネルギーで評価できる。当該量予見の比較（図1）から「酸素終端させた表面上のCrシート」が最も高い接合強度を持つことが結論付けられた。また水素終端の場合、金属種に依らず接合強度は軒並み非常に低いことが予見された。電子状態計算による状態密度解析から、局在性の高い表面状態の消失と、フェルミ準位での状態密度の大小を評価する事で、接合のオーム性や電気伝導性を推し量ることが出来る（図2）。この評価では「終端処理のない表面上のTiシート」が最もよい特性を示した。ただし、接合強度は上記「酸素終端/Cr」の半分程度と予見されている。当該計算では、金属種と終端処理のパターン数の積、つまり、60パターンもの計算が必要であり、本学計算機ファシリティを活用した。

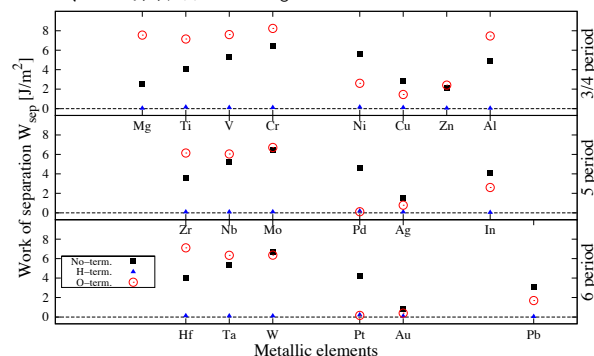


図1; 各種金属シートを、終端処理の異なるダイヤモンド表面（酸素終端/水素終端/終端無し）に接合したときの接合強度の比較。酸素終端/Cr」は「終端なし/Ti」の約2倍の接合強度をもつことが予見された。

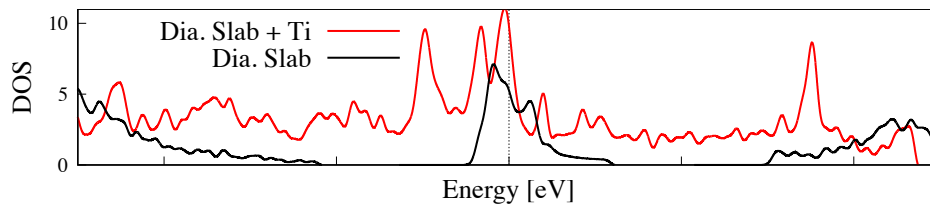


図 2; ダイヤモンド・スラブ単体とダイヤモンド・スラブに Ti シートを接合させた系の状態密度 (DOS) の比較。中央の点線はフェルミ・エネルギーを表しており、Ti シート接合後にはフェルミ・エネルギー周りの局在表面状態が消失していることが確認できる。

List of Publications:

- [1] T. Ichibha, K. Hongo, I. Motochi, N.W. Makau, G.O. Amolo, and R. Maezono, "Adhesion of electrodes on diamond (111) surface: A DFT study", *Diam. Relat. Mater, Elsevier* 81, 168-175 (2017/IF= 2.561). [原著/査読有]
- [2] 市場友宏、本郷研太、前園涼、「第一原理計算によるダイヤモンド-金属電極間の接合強度予見と電気的特性評価」、第 78 回応用物理学会 秋季学術講演会、6p-A412-14、福岡国際会議場、2017 年 09 月 05 日。[口頭発表/査読無]

DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY OF HYDRODEOXYGENATION AND DECARBONILATION MECHANISM OF METHYL BUTANOATE ON NiMoS SURFACES.

Hermawan Kresno Dipojono, Ryo Maezono/ School of Information Science

PROJECT DESCRIPTION:

The first step to uncover the underlying mechanism of hydrodeoxygenation (HDO) and Decarbonilation (DCO) of palm oil is to find the active site of trigilseride adsorption over the catalyst. One of the compound that compose trigilseride is methyl butanoate and we use MoS₂ surface with nickel promoters for catalyst model. Our previous result from (FY2016 project) shows that methyl butanoate prefer to adsorp on M-edge than on S-edge. It also show that C-O bond cleaving of methyl butanoate determine the reaction selectivity to HDO or to DCO. The figures below show the first step of C-O bond cleaving of methyl butanoate with various nickel compound.

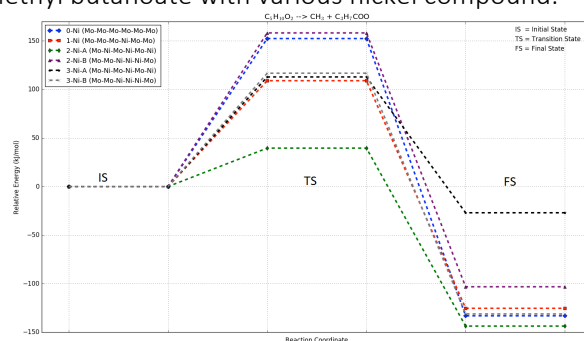


Figure 1. Catalytic reaction of $C_3H_7COOCH_3(S) + S \rightarrow CH_3(S) + C_3H_7COO(S)$ *S = surface

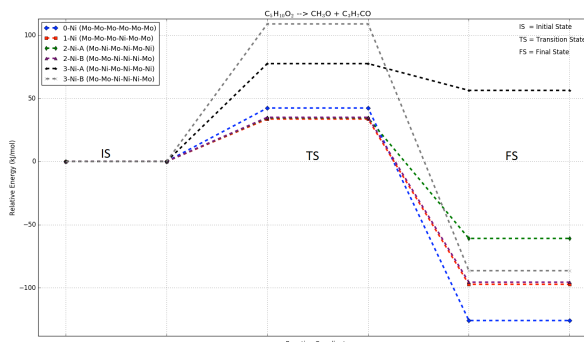


Figure 2. Catalytic reaction of $C_3H_7COOCH_3(S) + S \rightarrow CH_3O(S) + C_3H_7CO(S)$ *S = surface

This project attempts to investigate the HDO and DCO mechanism of methyl butanoate over MoS₂ surface with nickel promoters. Reaction pathways for HDO and DCO mechanism of methyl butanoate on NiMoS surfaces is investigated by Nudged Elastic Band (NEB) using density functional theory (DFT). This investigation consists of barrier energy calculation.

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] Density functional study of Methyl Butanoate Adsorption and its C-O Bond Cleaving on NiMoS Surface, [Wahyu Aji Eko Prabowo, Subagio, Ryo Maezono, Adhitya Gandaryus Saputra, Mohammad Kemal Agusta, Nugraha, Supriadi Rustad, Hermawan Kresno Dipojono], [Journal of Saudi Chemical Society]. (Preparing manuscript from FY2016 scheme)

[2] Density Functional Theory Study of Hydrodeoxygenation and Decarbonilation Mechanism of Methyl Butanoate on NiMoS Surface, [Wahyu Aji Eko Prabowo, Subagio, Ryo Maezono, Adhitya Gandaryus Saputra, Mohammad Kemal Agusta, Nugraha, Supriadi Rustad, Hermawan Kresno Dipojono], [Journal of Catalysis].

FINITE TEMPERATURE PROPERTIES OF HIGH PRESSURE HYDROGEN

Bartomeu Monserrat, Ryo Maezono/School of Information Science.

PROJECT DESCRIPTION:

Hydrogen is the most abundant element in the Universe, and as such it is a major component of many astrophysical objects including planets and stars, in which it is found under extreme conditions of pressure. Furthermore, high pressure hydrogen is an exotic material which has been predicted to exhibit properties ranging from room temperature superconductivity to zero temperature quantum fluidity, driven by the quantum nature of the constituent protons.

In order to investigate all these properties, it is necessary to first understand the phase diagram of hydrogen: what structures are stable under particular pressure-temperature conditions? In order to answer this question, we use a recently developed methodology that allows us to incorporate an accurate description of the quantum motion of protons [PRB **87**, 144302 and PRB **92**, 184301]. With this new method, we can accurately predict the stability of candidate hydrogen structures, to both explain experimental observations and to guide experiment towards realizing the exotic phases that might exist in high pressure hydrogen.

As part of the collaboration with the group of Prof. Ryo Maezono, we have shared our codes that implement the finite temperature theory to study the quantum and thermal motion of protons with unprecedented accuracy.

PUBLICATION LIST

[1] J. Trail, B. Monserrat, P. Lopez Rios, R. Maezono, and R. J. Needs, Phys. Rev. B **95**, 121108(R) (2017)

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

Multiple publications arising from the use of our vibrational quantum and thermal codes in the area of high pressure science, with an initial emphasis on high pressure hydrogen.

ANHARMONIC CALCULATIONS IN CALCIUM SILICATE UNDER EXTREME CONDITIONS AND HYBRID PEROVSKITE SOLAR CELLS

Joseph Prentice, Ryo Maezono/School of Information Science

2. PROJECT DESCRIPTION:

We have been conducting large-scale calculations including anharmonic vibrational effects on hybrid organic-inorganic perovskite systems. These systems have great potential as solar cell materials, but are not yet fully understood. Our calculations aim to study the effect of the motion of the organic molecule contained within the perovskite lattice on the electronic band structure. This is important as the band structure directly affects these materials' use in solar cells. It is hoped that by understanding these systems better we can move towards using them in practical circumstances as solar cells. We have also been conducting similar calculations on calcium silicate perovskite, one of the main components of the Earth's lower mantle. The structure of this material under the extreme conditions seen in the lower mantle is still not well understood, which has implications for our understanding of the interior of the Earth, including seismic waves. We aim to produce the highest accuracy calculations yet of the relative energies of several possible structures of calcium silicate under lower mantle conditions, and help achieve a complete understanding of this important material.

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1] 'First principles anharmonic study of calcium silicate in the lower mantle',
R. Maezono, Phys. Rev. Materials.

First Principle Calculations of Electronic and Phonon Properties of ThCr₂Si₂-Type Structure

Aniwat Kesorn, Kenta Hongo/*RCACI*, and Ryo Maezono/*School of Information Science, JAIST*
E-mail: mwkanw1708@icloud.com

Abstract:

We developed high-throughput screenings of the phonon properties over around 1,000 compounds with ThCr₂Si₂-type structure, being known as superconductors. The electronic structure of the compounds are performed based on density functional theory which are electronic band structure, density of state and Fermi-surface. The first principle calculation and finite displacement method are applied for phonon calculations. The compounds without imaginary frequency in phonon dispersion, which imply that the structures is stable in the symmetry I4/mmm, are provided the thermal properties as a function of temperature that are Helmholtz free energy, entropy and specific heat capacity at constant volume.

List of Planed Publications:

[1] First Principle Calculations of Electronic and Phonon Properties of ThCr₂Si₂-Type Structure, Aniwat Kesorn, Keishu Utimula, Kousuke Nakano, Kenta Hongo, Sujin Suwanna, Ryo Maezono.

Machines:

XC40 (VASP)

First principle Study of H₂O Molecule Adsorption and Dissociation on CuO Catalyst Surface

Faozan, Ryo Maezono / School of Information science.

PROJECT DESCRIPTION:

Dispersion-corrected DFT+U is performed on H₂O adsorption and dissociation on stoichiometric and nonstoichiometric CuO(111) surface. H₂O favorably adsorbs on the top Cu_{sub}-Cu_{sub} bridge in stoichiometric and oxygen pre-adsorbed surface and on the top of Cu_{sub} in oxygen vacancy surface. Based on changes in OH bond length and angle distortion, we conclude that the adsorption of H₂O on oxygen pre-adsorbed CuO (111) surface will weaken the OH bond more significantly as compared to H₂O adsorption on stoichiometric and oxygen vacancy defect CuO(111). The H₂O molecule is strongly adsorbed on oxygen vacancy defect surface with the adsorption energy of -1.064 eV, followed by stoichiometric surface (-0.868 eV) and oxygen pre-adsorbed surface (-0.829 eV). Charge transfer takes place through electrons transfer from the H₂O molecule to CuO (111) surface that can be observed from the shifting, broadening, and splitting of the DOS peaks. The broadening LDOS of H₂O around Fermi level determines that H₂O molecule is well absorbed on the surface, whereas the splitting of 1b₁ molecule orbital into unoccupied state indicates the bond weakening of H₂O. The dissociation of H₂O into OH and H species on CuO (111) are exothermic with the lowest reaction energy is -0.74 eV on oxygen vacancy defect surface followed on oxygen pre-adsorbed surface (-0.31 eV) and stoichiometric surface (-0.29 eV). Surface modification of CuO (111) with oxygen pre-adsorbed significantly reduces the barrier energy of H₂O dissociation up to 0.041 eV as compared to the stoichiometric surface of 0.18 eV and oxygen vacancy defect surface of 0.17 eV. These results indicate that CuO(111) surface exhibits a strong catalytic activity for H₂O dissociation and the surface modification of CuO (111) with oxygen pre-adsorbed significantly reduces the barrier energy of H₂O dissociation and with oxygen vacancy defect can increase the reactivity of surface in H₂O adsorption.

PUBLICATION LIST

- [1] A DFT+U Study of H₂O Molecule Adsorption and Dissociation on Stoichiometric and Non-Stoichiometric CuO(111) Surface (submitted to Applied Surface Science journal)

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1] 'A DFT study of CO₂ Adsorption and Hydrogenation on CuO Surface', [Ryo Maezono], [Physical Chemistry Chemical Physics].

Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions

Hunkao Rutchapon, Kenta Hongo/*RCACI*, and Ryo Maezono/*School of Information Science, JAIST*
E-mail: mwkhnk1709@icloud.com

Abstract:

SmFe₁₂ is one of the candidate magnetic phases for replacing traditional NdFe₁₂ phase permanent magnet. Zr and Ti substitutions were found to improve the stability and magnetization of SmFe₁₂, which is also determined by the amount and site of substitution. In this work, we generated several possibilities of those substitutions using density function theory (DFT) and their corresponding X-ray diffraction (XRD) patterns. Hierarchical clustering analysis and dynamic time wrapping (DTW) for similarity measurement were applied to classify the simulated XRD patterns. We obtained decent performance to distinguish alloy substitutions from XRD patterns. Our developed technique will be further applied to the experimental XRD patterns and support the development of SmFe₁₂ phase permanent magnet.

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS :

[1] Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions, Rutchapon Hunkao, Keishu Utimula, Masao Yano, Hiroyuki Kimoto, Kenta Hongo, Shogo Kawaguchi, Sujin Suwanna and Ryo Maezono.

Machines:

XC40 [VASP]

VPCC [Python]

METAL-BLACK PHOSPHORUS CONTACTS: A DFT STUDY

Sujoy Saha, Ryo Maezono/School of Information science.

PROJECT DESCRIPTION:

This study aims to explore possible metal electrodes to be used in high performance Black Phosphorus based transistors, from eighteen different metals which are studied in terms of direct contacts with pristine Black Phosphorus as well as Black Phosphorus with oxygen and hydrogen termination separately. The metals are chosen for the above mentioned cause on the basis of two key factors namely, the strength of adhesion of a given metal with Black Phosphorus (for direct as well as oxygen and hydrogen terminated contacts) and the electronic properties of the metal-Black Phosphorus interfaces. The strength of adhesion is measured in terms of Work of Separation of the interface systems that is obtained from DFT (Density Functional Theory) simulations. The study of electronic properties of the interfaces includes determining whether the interface forms a good Ohmic or Schottky contact or none. These properties are inferred from the analysis of DOS (Density of States) diagrams which are again based on DFT approach.

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1] 'Metal-Black Phosphorus Contacts: A DFT Study', [Prof. Ryo Maezono, Watanabe Nobuya, Ichibha Tomohiro], [journal (temporary)].

3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバ利用研究

Single-Molecule Imaging of a Polymer and All-atom MD Simulations

Tomoyuki Ikai and Ken-ichi Shinohara

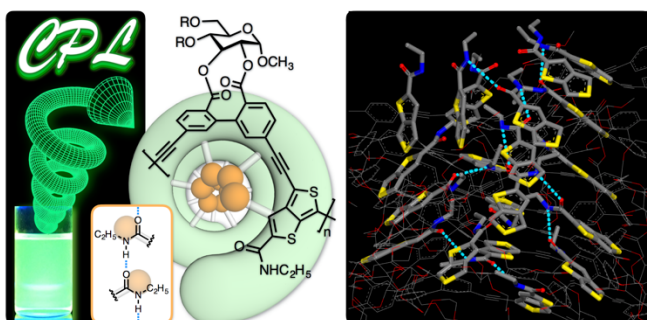
井改知幸 (金沢大物質科学)、篠原健一 (北陸先端大マテリアル)

使用計算機 : Fujitsu CX250 Cluster (pcc)

使用ソフト : BIOVIA Materials Studio (Forcite, Amorphous Cell)

Synthesis of a helical π -conjugated polymer with a dynamic hydrogen-bonded network in the helical cavity and its circularly polarized luminescence properties (1)

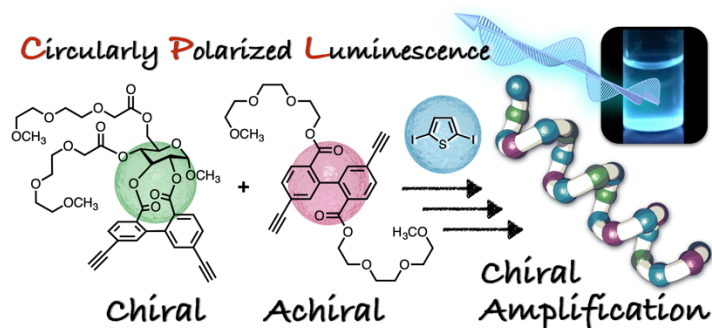
An optically active π -conjugated polymer (poly-1) containing glucose-linked biphenyl units in the main chain was synthesized via polymerization using an amide-appended 4,6-diiodothiopheno [3,4-b]thiophene as a cross-coupling partner. Based on the characteristic chiroptical properties of poly-1, combined with the result of all-atom molecular dynamics simulation, a cooperative intramolecular hydrogen-bonded network among amide pendants was considered to form in the helical cavity and to play a crucial role in the stabilization of the helically folded state. The helical poly-1 efficiently emitted circularly polarized light upon photoirradiation in solution and the film state.



Chiral Amplification in π -Conjugated Helical Polymers with Circularly Polarized Luminescence (2)

A series of D-glucose-bound optically active π -conjugated polymers (poly-Tr) were synthesized by ternary copolymerization of 2,5-diiodothiophene with diethynyl monomers containing a chiral and an achiral biphenyl unit using the Sonogashira coupling reaction. The effect of the chiral and achiral biphenyl contents on the chiral amplification in the preferred-handed helix formation (“the sergeants and soldiers effect”) was investigated by comparing the circular dichroism (CD) and circularly polarized luminescence (CPL) intensities of poly-Tr to that of the corresponding helical polymer (poly-T) without an achiral biphenyl unit. We observed that even when the chiral biphenyl content in the copolymer was 50 mol % (poly-T0.50), its CD and CPL intensities were almost comparable to that of poly-T, demonstrating the amplification of the helicity. All-atom MD simulation demonstrates that the helically folded structure

was maintained over the calculation period and was likely to be the preferred conformation for poly-T0.50 in acetonitrile/chloroform (70/30, v/v), which is in good agreement with the experimental result obtained from the CD analysis.



研究業績

査読付き論文

1. Tomoyuki Ikai, Seiya Awata, Ken-ichi Shinohara, "Synthesis of a helical π -conjugated polymer with dynamic hydrogen-bonded network in the helical cavity and its circularly polarized luminescence property", *Polym. Chem.* **9**, 1541-1546 (2018). 【表紙掲載】
2. Tomoyuki Ikai, Sho Shimizu, Seiya Awata, Ken-ichi Shinohara, "Chiral Amplification in π -Conjugated Helical Polymers with Circularly Polarized Luminescence", *Macromolecules* **51**, 2328-2334 (2018).

分子シミュレーションを用いた糖鎖の配座空間探査

マテリアルサイエンス系・山口拓実
使用計算機: Cray XC40, PC クラス
タシステム

概要

糖鎖は、タンパク質間のコミュニケーションを制御し、細胞の秩序立った働きを調節する重要な役割を担っている。私たちは、このような糖鎖の立体構造のダイナミクスを通じて発揮される生物機能の理解を深めるために、物理化学計測実験と分子動力学計算を組み合わせた糖鎖の動的立体構造解析法を開発してきた。本研究では、実験データに裏付けられた分子シミュレーション結果を基に、細胞内のタンパク質品質管理システムに関わるオリゴ糖鎖が示す立体配座空間の探査を行った。

タンパク質品質管理機構の中核を担う高マンノース型糖鎖は、三本の枝に分かれた分岐構造をしている。一連の糖鎖を対象に、Cray XC40 ならびに PC クラスタシステムを使用した、AMBER プログラムパッケージによる全原子分子動力学計算によって蓄積した原子座標データの分布解析を行った。その結果、三本の分岐鎖の挙動が有意に異なることが明らかとなり、オリゴ糖鎖の構造揺らぎの中に存在する準安定構造を見出すことに成功した。こうしたコンフォメーションの制御機構を詳細に調べたところ、糖鎖がその広大なコンフォメーション空間の中で特定配座に留まる際には、配列上では遠位に位置する糖残基間での水素結合形成が重要であることが示唆された。また、分子内水素結合の形成や組み替えが、糖鎖のダイナミックな構造変化に寄与していることも浮かび上がってきた。

さらに、分子シミュレーションと X 線結晶構造解析法の組み合わせによる分子認識プロセス解析にも取り組んだ。これにより、単純な糖鎖の配列識別に留まらない、糖鎖-タンパク質複合体の動的な相互作用機構が明らかとなっていった。

関連発表論文

- 1) T. Suzuki, M. Kajino, S. Yanaka, T. Zhu, H. Yagi, T. Satoh, T. Yamaguchi, K. Kato, "Conformational analysis of a high-mannose-type oligosaccharide displaying glucosyl determinant recognised by molecular chaperones using NMR-validated molecular dynamics simulation," *ChemBioChem*, 18, 396-410, (2017). 査読有
- 2) 山口拓実, 渡邊東紀男, 矢木宏和, 加藤晃一, "分子動力学計算と NMR 計測を用いた糖鎖の配座空間探査," *J. Comput. Chem. Jpn.* 17, 1-7 (2018). 査読有
- 3) K. Kato, H. Yagi, T. Yamaguchi, "NMR characterization of the dynamic conformations of oligosaccharides," In: *Modern Magnetic Resonance* (G. Webb eds), Springer, pp 737-754 (2018).
- 4) 堀 由樹, Yan Gengwei, 山口拓実, "NMR による糖鎖の相互作用解析のための常磁性プローブ合成," 平成 29 年度 北陸地区講演会と研究発表会, 能美, 2017 年 12 月.
- 5) 中根健汰, 鈴木達哉, 谷中冴子, 加藤晃一, 山口拓実, "分子シャペロンによるモノグルコシル化糖鎖認識機構の解析," 日本化学会第 98 春季年会, 船橋, 2018 年 3 月.
- 6) 龍岡博亮, 堀 由樹, 山口拓実, "NMR 計測によるルイス X 糖鎖のダイナミクス解析," 日本化学会第 98 春季年会, 船橋, 2018 年 3 月.

High proton conduction of organized sulfonated polyimide thin films with planar and bent backbones

School of Materials Science
Yutaro Ono, Yuki Nagao
Used MPC : pcc

Fast proton conduction was achieved in organized lamellar structures with in-plane oriented structure parallel to the substrate surface using a lyotropic liquid-crystalline (LC) property. Alkyl sulfonated polyimides (ASPIs) with bent main chain structure were newly synthesized to investigate relations between the higher order structure and proton transport properties. Density functional theory (DFT) calculations were performed to obtain polymer unit length using the DMol3 package in Materials Studio 2017 (BIOVIA). The Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) function was chosen. The periodic unit almost matches the experimental d-spacing values of 16 and 22 Å ($q_y = 0.37$ and 0.28 \AA^{-1} , respectively). Proton conductivity of all polyimide thin films was greater than $10^{-2} \text{ S/cm}^{-1}$. Grazing-incidence small-angle X-ray scattering (GI-SAXS) revealed that both planar and bent ASPI thin films exhibited humidity-induced lyotropic lamellar structure. The calculated unit length with planar ASPIs and the estimated unit length from GISAXS result matched well.

Results demonstrate that sulfonated alkyl side chains contribute strongly to the lyotropic LC property, which enhances molecular orderings and proton conductivity by water uptake. This study extends knowledge of the molecular design for highly proton conductive polymers with humidity-induced lyotropic LC property.

Acknowledgment

The authors thank prof. Shusaku Nagano at Nagoya University for determining the organized structure by in situ GI-SAXS. The authors thank prof. Takashi Abe at Niigata University for determining the water uptake by in situ QCM.

Publications (peer-reviewed)

1. Y. Ono, R. Goto, M. Hara, S. Nagano, T. Abe, Y. Nagao, “High proton conduction of organized sulfonated polyimide thin films with planar and bent backbones”, *Macromolecules*, **51**, 3351 - 3359 (2018).
2. Y. Nagao, “Proton-Conductivity Enhancement in Polymer Thin Films (Invited Feature Article, Cover Art)”, *Langmuir*, **33**, 12547 - 12558 (2017).

C. elegans の集団運動の数理モデルに関する研究

マテリアル・永井 健

使用計算機: hpcc, uv3000, xc40

概要

孤立している *C. elegans* は基盤上で頭を前にして移動し続ける。この時、回転速度が長時間維持されることがこれまでの研究からわかっている。また、2 個体が衝突すると運動方向が平行か反平行に揃う。衝突後は *C. elegans* の体表について水を通じて引力が働く。これらの特徴を考慮して *C. elegans* 集団のダイナミクスを下記のようにモデル化した。

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= e_{\theta_i} + \sum_{r_{ij} < r^r} \mathbf{F}_{ij}^r + \sum_{r^r < r_{ij} < r^a} \mathbf{F}_{ij}^a \\ \dot{\theta}_i &= \omega_i + \sum_{r^r < r_{ij} < 1} \sin 2(\theta_j - \theta_i) / \sum_{r^r < r_{ij} < 1} \\ \dot{\omega}_i &= -(\omega_i - \omega_0) / \tau + \sqrt{2/\tau} \sigma_\omega \xi_i(t) \\ \mathbf{F}_{ij}^r &= k^r (r_{ij} - r^r) \mathbf{e}_{ij} \\ \mathbf{F}_{ij}^a &= k^a / r_{ij} \mathbf{e}_{ij}\end{aligned}$$

r 、 θ 、 ω はそれぞれ粒子 i の位置、運動方向、回転速度を表す。 \mathbf{F}_{ij}^a は r よりも近い距離にいる 2 粒子に働く引力である。粒子が接近しすぎないように r よりも近づくと斥力(\mathbf{F}_{ij}^r)を加える。第 2 式の第 2 項のために近くにいる粒子は平行か反平行に揃う。第 3 式の $\xi(t)$ は i と t が異なれば無相関となるホワイトガウシアンノイズであるため、 ω は τ ほどの時間、値を維持する。粒子密度が高く引力の強さ(k)が弱いと、*C. elegans* 集団と同様にランダムな大きさを持つ渦で空間が埋め尽くされる(図 1a)。

2017 年度は上に記述したモデルの集団運動の k 依存性と自発的に動かない粒子の割合に対する依存性を詳細に調べた。 k を大きくしていくと渦の大きさが徐々に大きくなっていき、ある値より大きくすると渦が崩壊する(図 1a-c)。渦の崩壊後は粒子が多数集まった動かない塊ができる(図 1d)。自発的に動かない粒子の発展方程式として上の第 1 式の \mathbf{e}_{θ_i} と第 2 式の ω に $\mathbf{0}$ をかけたものを用いた。動かない粒子の割合が三割以下の場合、割合が大きいほど渦が崩れる k の値が大きくなっていくことがわかった。これらの傾向は *C. elegans* の集団運動の傾向と対応がある。

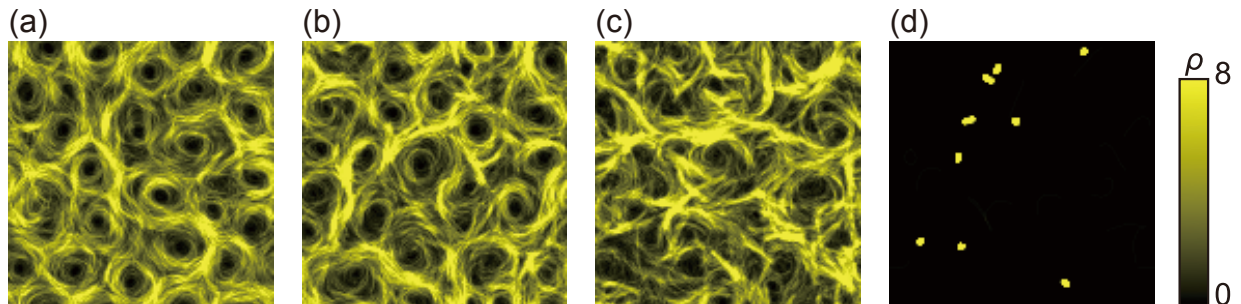


図 1: 集団運動の k 依存性。左から $k=0.0015$ (a)、 0.003 (b)、 0.0045 (c)、 0.009 (d)。

関連取得研究費

- 1) 基盤研究(B)(特設分野研究)

First-principles study of interaction of nitrogen beam with silicon and carbon dioxide molecule adsorption on graphene under external electric field

Muruganathan Manoharan

Mizuta-Manoharan Lab, School of Material science, JAIST,

Machines used: Cray XC40, SGI UV1000

Program code: SIESTA, OpenMx

Focused ion beam technology with light gas ions has recently gained attention with the commercial helium and neon ion beam systems. These ions are atomic, and thus, the beam/sample interaction is well understood. In the case of the nitrogen ion beam, several questions remain due to the molecular nature of the source gas, and in particular, if and when the molecular bond is split. The experimental results showed that the nitrogen is ionized as molecule, and it is expected that the nitrogen bond is broken upon interaction with the target. To confirm this behavior and investigate the depth at which the splitting occurs, MD ab initio simulations were performed using OpenMX code which was implemented in the framework of density functional theory.

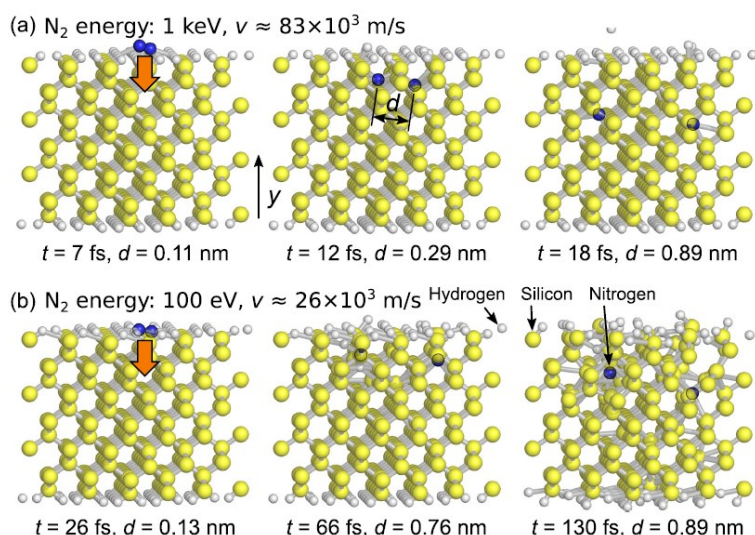


Fig.1 Molecular dynamics simulation results for N_2 impinging on silicon with total energy of (a) 1 keV and (b) 100 eV [1].

Density functional simulations were performed to study the adsorption of carbon dioxide gas molecules on the graphene for different electric fields. In order to do more accurate gas adsorption calculations, we have used the nonlocal correlation functional proposed by Dion et al. (referred as vdW-DF). All the vdW-DF calculations were performed with the SIESTA package. vdW-DF calculations were performed with SIESTA and molecular dynamics simulations were done with OpenMX package [2].

Published papers:

1. Schmidt, M. E., Zhang, X., Oshima, Y., Anh, L. T., Yasaka, A., Kanzaki, T., ... & Mizuta, H. (2017). Interaction study of nitrogen ion beam with silicon. *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena*, 35(3), 03D101.
2. 水田博, スンジアン, and ムルガナタンマノハラ. "グラフェンを用いたナノセンサ素子による二酸化炭素分子 1 個の検出." *応用物理* 87.3 (2018): 193-197.

Obtained budget:

1. Highly-accurate and self-powered environmental sensor based on integrated graphene NEMS-nano particles with signal amplification Kakenhi Number:18K04260 (PI: Muruganathan M.).

自発的な分子集合体の形成とその外場応答

マテリアルサイエンス系 講師 下川 直史

東京大学 物性研究所 物質設計評価施設 助教 樋口 祐次

大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 招聘研究員 伊藤 弘明

使用計算機：SGI Altix UV3000, Cray XC40

【研究背景】

高分子・液晶・コロイド・両親媒性分子・生体物質などの物質群はソフトマターと呼ばれ、熱揺らぎ程度での容易な変形、高い内部自由度、実時間で観測可能なほどの遅いダイナミクス（長い緩和時間）、階層的な秩序構造といった性質を有している。ソフトマターの平衡・非平衡での秩序形成の理解は工業的な応用だけに留まらず、生物・医学の発展にも寄与している。

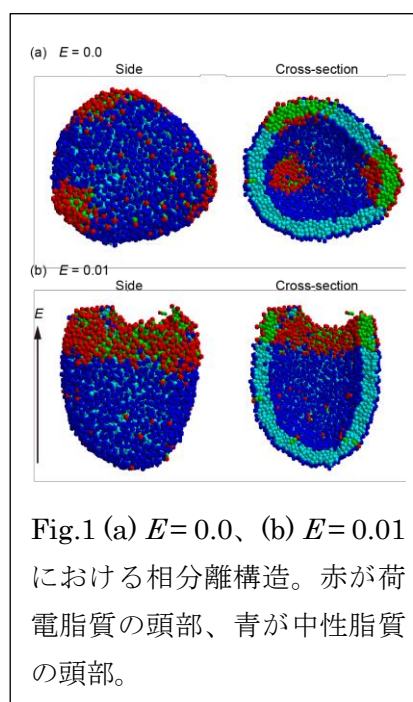
ソフトマターの構成単位は巨大なマクロ分子であったり、分子集合体であったりと非常に大きい。さらに、変形や相分離といった多数の分子が共同的に動く現象がターゲットとなる。計算機シミュレーションによりこれらマクロな現象を記述することは有用であるが、全原子計算などは計算コストがかかりすぎ現実的ではない。そこで、構成分子を“粗視化”することで、計算コストを落とし、長時間で多数の分子が引き起こす現象の記述に取り組んだ。

【研究成果】

1. 電場下における荷電脂質膜の相分離と変形挙動

生体膜のモデル系や薬剤送達の器として、人工脂質二重膜小胞（リポソーム）が用いられている。従来は電氣的に中性なリン脂質が研究の対象となっていたが、本研究では生体膜に荷電脂質が含まれることに注目し、荷電脂質を含むリポソームの粗視化分子動力学シミュレーションを用いて静電相互作用と構造の関係を調べてきた。

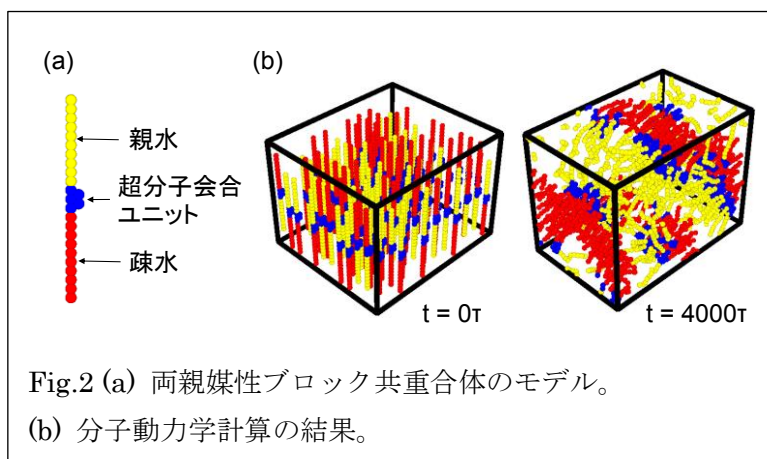
相分離ドメインの位置やダイナミクスの制御を目的として、外場として直流電場 $\mathbf{E} = e_z E = (0, 0, E)$ を与えた。結果の一例を Fig. 1 に示す。電場を与えない場合 ($E = 0$) は通常のエリスロチックな相分離が進行するのに対し ([1]、Fig. 1a)、電場を与えた場合 ($E = 0.01$) は荷電脂質の相分離ドメインが電場の方向に集まることで、膜面内の静電反発による膜孔形成が生じることがわかった (Fig. 1b)。この結果から、荷電脂質リポソームに対して外部電場を用いることで、形状変形や膜孔形成の位置やタイミングを制御できる可能性が示唆される。今後はより広いパラメータ領域でのダイナミクスや、膜孔の安定性などを精査していく。



2. 両親媒性ブロック共重合体の自発的高次構造形成

両親媒性ブロック共重合体の集合構造はナノ材料への応用が期待されている。材料として使用するには集合構造を希望の形状にすることが必要である。一つの例として、一軸成長の制御が課題であり、その生成条件は、疎水部を結晶性の高分子にすること、超分子会合ユニットが疎水部と親水部の間にあること、であると実験で示されているがメカニズムは分かっていない。そこで分子論的理解に基づく集合構造の形状制御を目指し、粗視化分子動力学法を用いて、両親媒性ブロック共重合体の集合プロセスを検討してきた。

本年度は対象となる両親媒性ブロック共重合体のモデル化を検討した。初めに疎水、超分子会合ユニット、親水の三つのブロックをモデル化した(Fig. 2a)。平面に並べた初期条件から分子動力学計算を行うと、結晶性である疎水部が秩序構造を保ちながら安定化することが分かった(Fig. 2b)。同様の計算を、骨格無しで計算すると不安定化し、ミセル構造となった。このことから、骨格部分が秩序構造を安定化するのに重要であることが示された。この結果は実験結果を定性的に再現しており、正しいモデル化に成功したといえる。今後は疎水・親水部分の粒子数を増やし、高分子となった際の影響を詳しく調べていく。



【参考文献】

[1] H. Ito, Y. Higuchi, N. Shimokawa, *Phys. Rev. E*, **94**, 042611 (2016).

【関連業績】

学会発表

1. 「静電相互作用が支配するコロイドの膜透過シミュレーション」
下川 直史、伊藤 弘明、樋口 祐次、 日本物理学会 2017 年秋季大会
岩手大学上田キャンパス (平成 29 年 9 月 23 日)
2. 「Phase separation and morphological change of charged lipid membranes」
Naofumi Shimokawa, The 11th Mini-Symposium on Liquids “MSL2017”
九州大学伊都キャンパス (平成 29 年 10 月 14 日)

外部資金

1. 科学研究費 基盤研究(C) (代表)
「荷電脂質膜における多価イオン間静電相互作用と相分離」

(平成29年度～平成32年度)

2. 日本学術振興会 二国間交流事業共同研究 (スロベニア) (代表)

「荷電粒子と脂質膜の相互作用」

(平成30年度～平成31年度)

硫化物熱電材料のハイスループットスクリーニングに関する研究

所属・氏名 先端科学技術研究科 小矢野研究室・宮田全展

使用計算機: CrayXC40

概要

一次産業におけるエネルギーの内、約 66%が未利用排熱として無駄に捨てられている。その未利用排熱の内、蒸気タービンを用いてエネルギー回収が困難な 150°C以下の低温排熱が大きな割合を占めており、低温排熱からエネルギーを回収する革新的なエネルギー回生技術の開発が求められている。

熱電発電素子として応用され始めている代表的な熱電材料に Bi_2Te_3 , PbTe があげられる。これらは、高い熱電変換性能を有するが、希少元素テルル Te を多く含有するため応用上問題となっている。希少元素を含まない環境調和型熱電材料の候補として、硫化物熱電材料があげられる。硫化物熱電材料の主成分である硫黄 S は、元素周期表上で Te と同じ 16 族に属するため性質が似ており、かつ地殻に豊富に存在するため安価である。近年、硫化物熱電材料は精力的に研究が行われており、実験による経験則に基づく材料探索により高い熱電性能を示す硫化物熱電材料がいくつか報告されている。しかし応用の観点からすると、さらなる高性能硫化物熱電材料の創製を行うため経験的な材料設計指針だけでなく、より材料の電子物性・フォノン物性に踏み込んだマテリアルデザインを行う必要がある。

大量の硫化物に対し、電子輸送計算を用いたハイスループットスクリーニングを行うため、OpenMX と電子輸送計算コード BoltzTraP をつなぐインターフェイスプログラムを開発し、低計算コスト・高精度な電子輸送計算を実現した。809 種類の硫化物に対し、緩和時間近似のもと電子輸送計算を行うことで各熱電物性の相関関係を調査した。

Figure 1, 2 に電子輸送計算より得られた無次元性能指数 ZT_{DFT} に対する熱電能 S 、ローレンツ数 L 依存性を示す。 ZT_{DFT} は $|S|$ の増大に伴い増大し、 $140 \mu\text{VK}^{-1}$ (p 型)・ $-170 \mu\text{VK}^{-1}$ (n 型)で極大値を取る。 L の増大に伴って ZT_{DFT} は増大し一般的なローレンツ数 $L_0=2.45 \times 10^{-8} \text{V}^2\text{K}^{-2}$ で極大値を取る。これらは、「ヴィーデマンフランツ則が成り立つ場合は S が大きければ大きいほど ZT が高い」、「 μ 近傍の DOS は急峻なほど高性能熱電材料として有望である」という一般的な通説に対し、新たな指針を提案する結果である。本研究は本学マテリアルサイエンス研究科・博士論文にも掲載された。

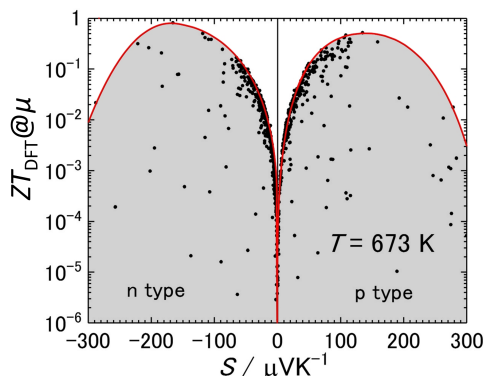


Fig. 1 ZT_{DFT} の熱電能 S 依存性

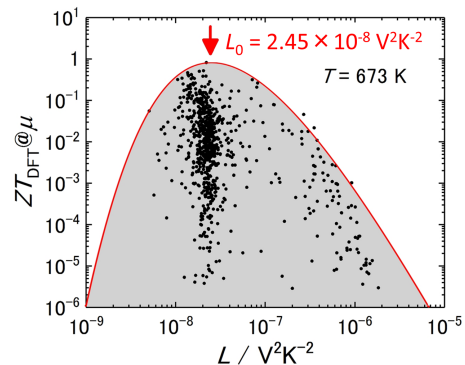


Fig. 2 ZT_{DFT} のローレンツ数 L 依存性

関連発表論文・学会発表

- 1) Miyata, M., Ozaki, T., Takeuchi, T. et al. Journal of Elec Materi **47**, 3254(2018). <https://doi.org/10.1007/s11664-017-6020-9>.
- 2) 実験と第一原理計算を活用した新奇硫化物熱電材料の創製とスクリーニング, 宮田 全展, 日本熱電学会 第 22 回研究会「硫化物系熱電変換材料研究の最新動向」, 東京, 東京工業大学, 2017. (招待講演)

Gaussian16 を用いた有機化合物の分子間力の計算

マテリアルサイエンス研究科 下田研究室 高岸秀行

使用計算機: pcc

液体材料の塗布性は分子間力の影響を強く受ける。このため分子間力を正確に見積もることは、実用上、極めて有用である。これまで下田研究室では実験的に有機化合物およびケイ素化合物の分子間力を測定してきた。本年度は前園研究室の指導の下、計算機上で分子間力を算出することに取り組んだ。

分子間力は様々な成分で構成されており、その中でも特に重要な成分が van der Waals force である。この指標となるのが Hamaker constant (A_{11}) であり、Eisenschitz-London の近似式を用いると次式で与えられる。

$$A_{11} = \frac{3\pi^2}{4} \alpha^2 I \rho^2$$

ここで α は静的分極率、 I はイオン化エネルギー、 ρ は数密度である。Gaussian16 を用いると有機化合物の α 、 I 、 ρ は容易に計算できる。

初めに α 、 I 、 ρ が既知の有機化合物 (約 30 種類) に関して、B3LYP および MP2 に各種基底関数系を組み合わせる計算を行い、精度を評価した。この結果、B3LYP/aug-cc-pVDZ を用いることで比較的高い精度で実験値を再現できることが分かった (実験値 $\pm 5\%$ 以内)。次に B3LYP/aug-cc-pVDZ を用いて一般的な有機化合物 (約 900 種類) およびケイ素化合物 (約 30 種類) の α 、 I 、 ρ を計算し A_{11} を算出した。 A_{11} 計算値を、実験的に算出した A_{11} (約 70 種類) と比較したところ、非極性分子に関しては平均絶対相対誤差が 20% 以内に収まったのに対して、極性分子に関しては大幅に過小評価する傾向が見られた

(図 1)。この原因の一つは Eisenschitz-London の近似式は van der Waals force の成分のうち分散力のみを計算するためであると考えられる。炭化水素や水素化ケイ素のような無極性分子の場合は分散力が支配的であるのに対して、アルコールのような極性分子は配向力や誘起力なども無視できない。したがって、この計算手法は非極性分子であれば適用可能であるが、極性分子には適用しがたい。

今回の検討で、非極性分子であれば極めて単純な計算のみで Hamaker constant を中程度の精度で算出出来ることがわかった。今後この計算を改良し、また、得られた A_{11} を液体塗布実験の参考値として利用する予定である。

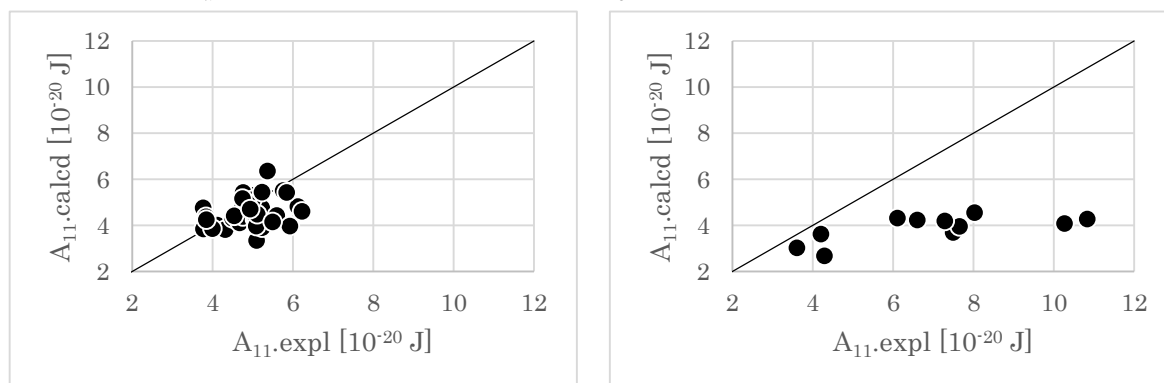


図 1. Hamaker constant の実験値 $A_{11,expl}$ と計算値 $A_{11,calcd}$ の比較。(左)非極性分子(炭化水素)、(右)極性分子(アルコール類)

FIRST-PRINCIPLES ASSESSMENT OF Nd-Fe-B THERMODYNAMIC PROPERTIES FOR APPLICATION IN CALPHAD

Adie Tri Hanindriyo, Soumya Sridar/Department of Metallurgical and Materials Engineering, IITM, K.C. Hari Kumar/Department of Metallurgical and Materials Engineering, IITM, Kenta Hongo/RCACI, and Ryo Maezono/School of Information Science, JAIST

E-mail: adietri@icloud.com

Abstract:

We investigated the thermodynamic properties of several intermetallic binary and ternary stable phases of the Nd-Fe-B system by first principles calculations in order to supply relevant information for the CALPHAD method. The Nd-Fe-B system is of great importance in industry and improving the phase diagram may be achieved through CALPHAD provided accurate and reliable thermodynamic data on its various phases is obtained. Two key properties are calculated by first-principles assessment: the enthalpy of formation and specific heat (in constant pressure, C_p). The effective Hubbard correction as derived by Cococcioni and de Gironcoli[1] is used in order to account for localized $3d/4f$ orbitals in Fe and Nd. Meanwhile, C_p is derived from calculation of phonon frequencies using the quasi-harmonic approximation (QHA). We obtained values for both enthalpy of formation and C_p which achieves good agreement with past experimental works. More importantly, we obtained reliable values for compounds, which either have not been experimentally determined in the past, or differ from past theoretical predictions (as shown in Figure 1). Our results are expected to contribute to the database and lead to a better description of the Nd-Fe-B phase diagram with CALPHAD.

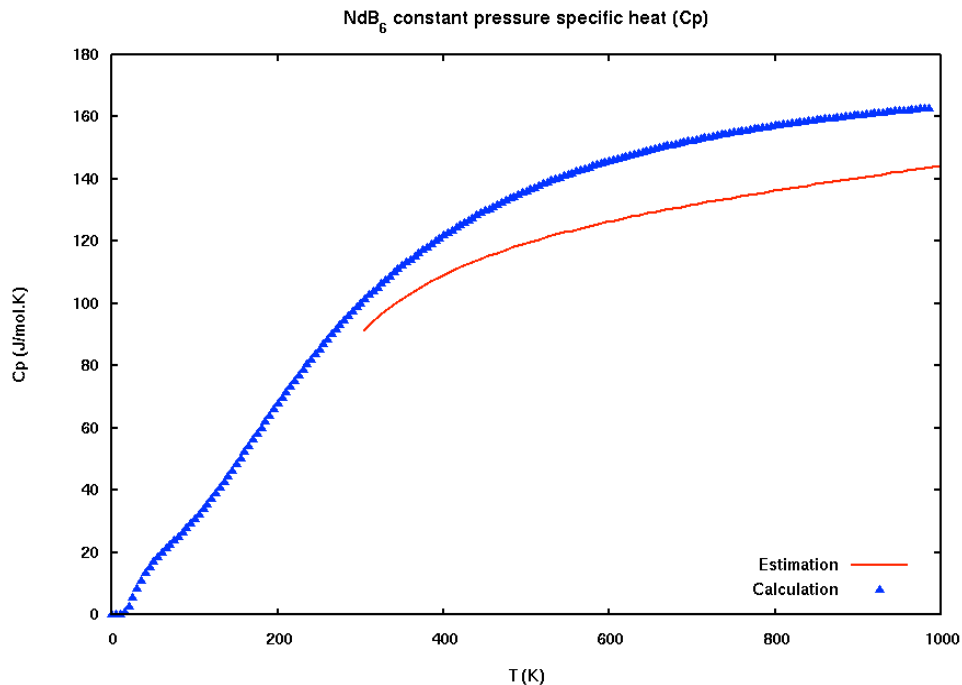


Figure 1 C_p for NdB_6 obtained in this work (blue) compared with a theoretical description made in the work of Bolgar et al.[2] (red)

References:

- [1] M. Cococcioni and S. de Gironcoli. "Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method". *Phys. Rev. B* 71, 035105 (2005)

[2] A.S. Bolgar, V.B. Muratov, A.V. Blinder, A.I. Kryklya, and A.P. Suodis. "Thermodynamic properties of the rare earth borides and carbides in a wide temperature range". *J. Alloys Compd.* **201**, 127-128 (1993)

List of Planned Publications:

[1] 'First-Principles Assessment of Nd-Fe-B Thermodynamic Properties for Application in CALPHAD'. Adie Tri Hanindriyo, Soumya Sridar, K.C. Hari Kumar, Kenta Hongo, Ryo Maezono. *Phys. Rev. Materials*

Machines

SGV UV3000 (Quantum Espresso)

CX250 (Quantum Espresso, VASP)

VPCC (VASP)

DIFFUSION MONTE CARLO STUDY OF BORON NITRIDE SYSTEMS

Genki Prayogo, Ryo Maezono/School of Information Science

PROJECT DESCRIPTION:

Cubic boron nitride (c-BN) is a very hard, chemically inert material that is also stable at high temperature and pressure. It is highly attractive for use as superhard coating materials and abrasives. Its fabrication requires very high temperature and pressure, in the range of 8 GPa at temperature of above 2000 K. A more recent technique adds aluminium nitride into melted phase of BN, which has been found to significantly lower the required temperature for c-BN formation. However, a reliable phase diagram for this system is currently unavailable, with previous experiments arriving at different conclusions. We aim to derive this computationally, starting with the BN polymorphs. There has been an established method for doing this, by combining computational thermodynamics with *ab initio* derived energetics. Density functional theory (DFT) is the *ab initio* method of choice for this approach, mainly due to its more accessible computational cost. It is however, unable to accurately describe van der Waals (vdW) interactions, which is unfortunately present in the hexagonal form of boron nitride (h-BN). We found that conventional gradient-corrected functional greatly overestimates interlayer distance in this phase, while supposedly vdW-corrected DFT functionals still failed to reproduce correct energetic ordering between various BN polymorphs. We expect the use of Diffusion Monte Carlo (DMC) instead of DFT will improve this considerably, as it is able to properly treat long-range correlation which give rise to the said vdW interaction.

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] 'Application of Diffusion Monte Carlo to the evaluation of thermodynamical properties of AlN-BN system', [G.I. Prayogo](#), S. Sridar, K.C. Hari Kumar, and R. Maezono, Phys. Rev. Materials.

DIFFUSION MONTE CARLO STUDY ON POLYTYPIC STABILITY OF SILICON CARBIDE

Genki Prayogo, Ryo Maezono/School of Information Science

PROJECT DESCRIPTION:

Silicon carbide exhibits polytypism, a special case of polymorphism where multiple numbers of stacking configurations can be formed on (0001) direction of the hexagonal primitive cell. This subtle difference in structure affects its electrical and optical properties quite significantly, with the bandgap of various SiC polytypes may vary between 2–3 eV. This is particularly important for its use in lighting diodes, where a slight wavelength change may significantly alter the perceived color of the emitted light. Controlling the formation to be limited to a single polytype is not easy. A mixture containing several different polytypes is normally reported during synthesis. Therefore, it is important to accurately estimate the region of stability for each polytype. Attempts to study this have been made using various levels of DFT functionals, however none has been successfully able to reproduce experimental tendencies.

In this study, we aim to establish a reliable ordering of stability between known SiC polytypes, at zero and finite temperatures. We are using Diffusion Monte Carlo, a highly accurate method that is not dependent on basis sets and approximated exchange-correlation functionals, but with a more favorable scaling than coupled cluster methods. We also seek to find whether it is possible to model the stability of silicon carbide with a simple model that can be extended to higher order polytypes of silicon carbide. This would allow to avoid explicitly simulating them, avoiding high computational costs associated with the large primitive cells of the higher order silicon carbide polytypes.

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] 'Diffusion Monte Carlo study on polytypic stability of silicon carbide', G.I. Prayogo, R. Maezono, A. Benali, New. J. Phys.

機械学習を用いた Ziegler-Natta 触媒の一次粒子構造の決定

所属・氏名 高棹 玄德, 谷池俊明

使用計算機: PC Cluster

不均一系 Ziegler-Natta 触媒はポリオレフィン生産の大部分を担う工業触媒である。現在工業的に多く用いられている $\text{TiCl}_4/\text{MgCl}_2$ 触媒系は触媒を構成するナノサイズの最小構造単位である一次粒子構造が高次凝集する事によって形作られる、マルチグレイン構造を形成している。その一次粒子構造は、工業的な応用上でも重要な意義を持つ情報であるが、その詳細は未だに解明されていない。

既存の計算化学は Ziegler-Natta 触媒に対し分子の吸着状態や、最も確からしい活性点の検証を行ってきたが、一次粒子のようなナノ粒子構造ではなく、無限遠の理想表面上に対するものに留まっていた。

そこで本研究では、遺伝的アルゴリズムと密度汎関数計算 (DFT) の併用により、不均一系 Ziegler-Natta 触媒一次粒子構造の非経験的決定プログラムの開発に取り組んでいる。

今年度は触媒担体となる MgCl_2 ナノ粒子および活性種前駆体を含んだ $\text{TiCl}_4/\text{MgCl}_2$ 系に対するプログラムを実装し、 15MgCl_2 および $15\text{MgCl}_2/4\text{TiCl}_4$ に対する構造探索を実施し、 TiCl_4 の存在が粒子形態に与える影響の検討を行った(図 1)。

15MgCl_2 からは $\{100\}$ 面によって構成された平行四辺形および台形の構造が安定構造として得られた。

$15\text{MgCl}_2/4\text{TiCl}_4$ に対する計算は未だ大域解に到達していないものの、得られた構造の粒子形態は 15MgCl_2 と異なる表面を露出し、ナノ粒子表面上における吸着子の存在が、粒子形態そのものに影響を及ぼす事を示唆するほか、既存の無限遠表面上の計算とは異なり、ナノ粒子上に複数種類の Ti 核種が共存する結果となった。

本研究では遺伝的アルゴリズム上、生成された多数の構造群に対し DFT による構造最適化を行う必要があり、その計算資源として本学の PC Cluster を利用している。

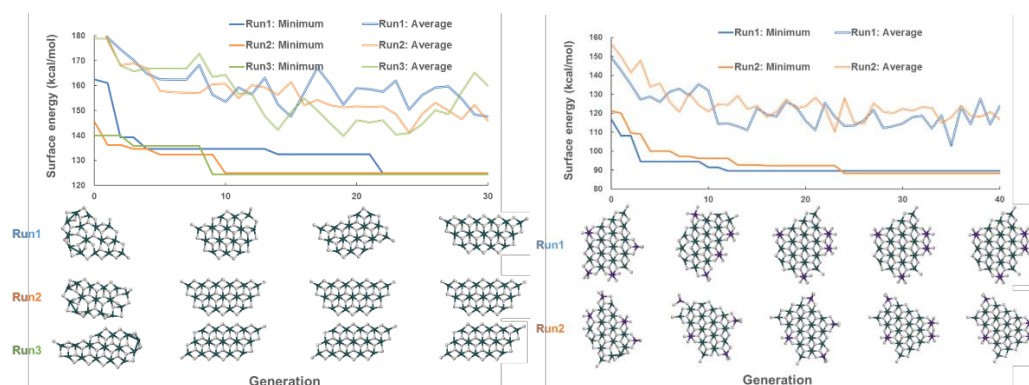


図 1. 15MgCl_2 (左) および $15\text{MgCl}_2/4\text{TiCl}_4$ (右) に対する構造決定の推移。

関連学会発表

- 1) "遺伝的アルゴリズムと第一原理計算を利用した触媒ナノ粒子の非経験的構造決定", 高棹 玄德, 谷池 俊明, 平成 29 年度北陸地区講演会と研究発表会, 能美, 2017 年 12 月 1 日, ポスター。

Evolution of p_z orbital with out-of-plane electric field in bilayer graphene

K. Afsal
Mizuta Lab,
School of Materials Science
JAIST
Machine Used : XC40
Program Code: SIESTA

An out-of-plane electric field has various effects on the physical properties of bilayer graphene (BLG) [1]. It is one of the methods used extensively to introduce the band gap in the BLG by breaking the symmetry between the top and bottom layers [2,3]. The immediate impact of the external electric field on the band structure of BLG reflects on the low energy bands such as valence band maximum (VBM) and conduction band minimum (CBM). As is well known, the major contribution to the VBM and CBM comes from the out-of-plane p_z orbitals of individual C atoms. Thus, we study the evolution of the p_z orbital with the perpendicular electric field using Density Functional Theory (DFT).

The *ab initio* calculations are performed using the LCAO method implemented in SIESTA [4] based on van der Waals exchange correlation functionals. These exchange correlation functionals compute the interlayer distance between the layers in bilayer graphene to a great accuracy. Wave functions are calculated using the utility Denchar, present in the SIESTA package.

References:

- [1] Y. Zhang *et al.*, Direct observation of widely tunable band gap in bilayer graphene. *Nature* **459**, 820–823 (2009).
- [2] E. McCann *et al.*, Asymmetry gap in the electronic band structure of bilayer graphene. *Phys. Rev. B* **74**, 161403(R) (2006).
- [3] E. V. Castro *et al.*, Biased bilayer graphene: Semiconductor with a gap tunable by electric field effect. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
- [4] J. M. Soler *et al.*, The SIESTA method for *ab initio* order- N materials simulation. *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 2745 (2002).

Publication:

- [1] K. Afsal, M. Manoharan, H. Mizuta, Evolution of p_z orbital with out-of-plane electric field in bilayer graphene. The 65th JSAP Spring meeting , March 17-20, 2018, Tokyo.

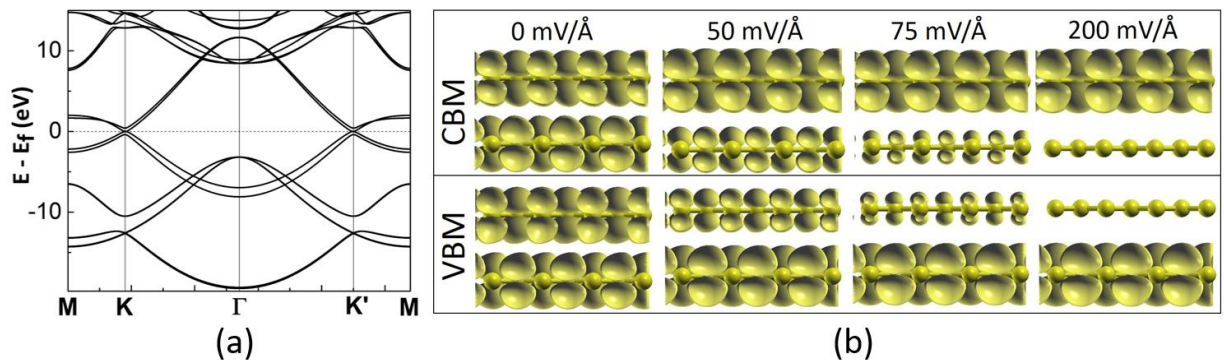


Figure 1: (a) Band structure of BLG along the high symmetry points. (b) Wave function corresponding to the VBM (bottom line) and CBM (top line) at different perpendicular electric fields (Isovalue: $0.15 \text{ \AA}^{-3/2}$).

ナノスケールにおける遷移金属の弾性率算定

先端科学技術研究科
大島研究室 石塚慧介
使用計算機: hpcc

機械部品や電子デバイスの微細化・集積化が進み、ナノ材料物性を理解する必要性が増している。特に、金属ナノワイヤーは、ナノスケールの電子機械デバイスの基本構成要素となることが期待されており、その物性に注目が集まっている。ナノワイヤーを始めとするナノ材料の物性を難解にしている現象の一つがナノスケール材料で顕著となるサイズ効果（物性と材料サイズの相関）である。

金属ナノワイヤーのヤング率のサイズ効果については、実験手法[1]、計算手法[2]の両面から、数多くの研究が行われている。しかし、これまでサイズ効果について統一的な見解は得られていない。実験面の問題は、測定手法の制約により取扱える試料サイズの下限が数十 nm スケールであることである。対して、計算面の問題は、計算コストの制約から、経験的力場計算しか実施されていないことである。

本研究は、遷移金属、特に Au ナノワイヤーの弾性率のサイズ効果の検証を目的とする。弾性率は、CASTEP を使った第一原理密度汎関数法計算で算定する。本研究で扱う Au は純金属であるため逆格子点が疎となり、計算結果の k 点サンプリング数依存が大きくなる。また、原子番号が大きく、相対論効果が強く現れる。そのため、ナノワイヤーの弾性率算定を実施するにあたり、計算条件の最適化が必要となる。

計算条件の検討はバルクの Au をサンプルとして行った。k 点依存は、サンプリング数を 1500 以上とすると計算値が集束することがわかった。また、計算に用いる交換相関汎関数の選定のために、GGA と LDA による計算を行い、文献値との比較を行った(表 1)。文献値(計算)との比較から、本研究の算定値は、これまでに算定された値と大きな食い違いが無いと言える。文献値(実験)との比較から、交換相関汎関数として GGA を用いた方が実験値をより再現できることがわかった。

表 1. バルク Au 弾性率の本研究算定値と文献値との比較

交換相関汎関数		本研究		文献値(実験)	文献値(計算)	
		GGA	LDA		GGA [5]	LDA [6]
格子定数 (Å)		2.88731	2.86297	2.884 [3]	2.88	2.8649
C_{ij} (GPa)	C_{11}	196.780	215.902	192.34 [4]	202.1	211
	C_{12}	159.123	179.063	163.14 [4]	174.2	183
	C_{44}	39.965	41.080	41.95 [4]	37.9	37

参考文献

- [1] G. Y. Jing, et al., *Phys. Rev. B* **73**, 235409 (2006).
 [2] B. Hyde et al., *JOM* **57**, 62 (2005).
 [3] J. D. Bass, *Elasticity of Minerals, Glasses, and Melts*. In *Mineral Physics & Crystallography: A Handbook of Physical Constants*
 [4] J. R. Neighbours and G. A. Alers, *Phys. Rev.* **111**, 707 (1958).
 [5] H. Wang and M. Li, *Phys. Rev. B* **79**, 335203 (2009).
 [6] B. A. M. Elsner et al., *Acta Materialia* **124**, 468 (2017).

ポリマー系における第一原理熱伝導率の評価

Keishu Utimula / School of Material Science, JAIST, Tom Ichibha / School of Information Science, JAIST
Ryo Maezono / School of Information Science, JAIST, Kenta Hongo / RCACI
mwkumk1702@icloud.com

2. PROJECT DESCRIPTION:

携帯化が著しい電子デバイスなどは、常に「軽量化」、「高い絶縁性」、「高い熱伝導率」といったニーズを抱えている。そこで一般的に軽く、また高い絶縁性を持つポリマーが注目されているが、アモルファスポリマーの熱伝導率は金属に比べて非常に低い。しかし、例えばポリエチレン結晶などは、軸方向に対して金属に匹敵する熱伝導率を持つことが報告されており[1][2]、高熱伝導率高分子の探索に希望が持てる。本研究では、これまで半導体等の無機結晶系に対して用いられてきた線形ボルツマン方程式の緩和時間近似による第一原理的熱伝導率評価を、既に実験参照値の知られているポリエチレン結晶、およびファイバーへ適用し、両者の熱伝導率が1桁異なる傾向を見事に再現した。

Axial Thermal Conductivity of Polyethylene

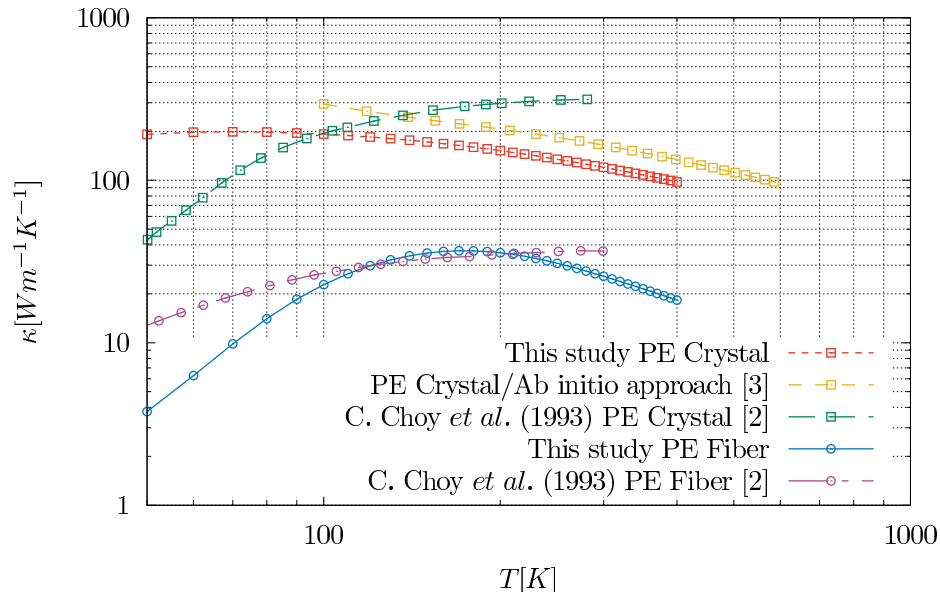


図1. ポリエチレン結晶に対する第一原理の先行研究結果(図中凡例[3])と、結晶及びファイバーの実験値(図中凡例[2])との比較。実験によりポリエチレンファイバーの熱伝導率が測定されており、またそこから推定された結晶の熱伝導率は、ファイバーのそれと1桁異なる[2]。我々の第一原理による結晶及びファイバーの熱伝導率算定結果はそのトレンドを見事に再現しているが、結晶の場合の熱伝導率は温度依存性が予見と大きく異なっている。一方、第一原理の先行研究とは似通った温度依存性が得られている。実験値との温度依存性の違いは、実験値が結晶そのものへの測定ではないことに起因すると考えられる。

REFERENCE:

- [1] C.L. Choy, S. Wong, K. Yong, J. Polym. Sci. Polym. Phys. 23, 1495 (1985).
- [2] C.L. Choy, Y. Fei, T.G. Xi, J. Polym. Sci. Polym. Phys. 31, 365 (1993).
- [3] N. Shulumba, O. Hellman, A. J. Minnich, Phys. Rev. Lett. 119, 185901 (2017).
- [4] Atsushi Togo, Laurent Chaput, and Isao Tanaka, Phys. Rev. B, 91, 094306 (2015).

LIST OF PLANNED PUBLICATIONS:

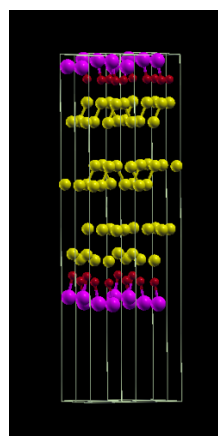
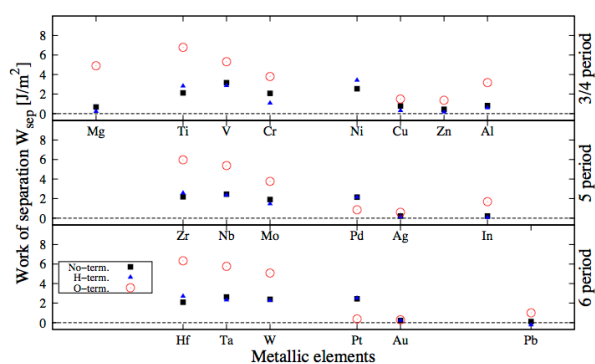
- [1] ' Ab initio thermal conductivity evaluation of polymer systems ', [Keishu Utimula, Tom Ichibha, Prof. Ryo Maezono, Prof. Kenta Hongo], [journal (temporary)].

ADHESION OF THE ELECTRODES ON BLACK PHOSPHORUS DEVICE SURFACES

Nobuya Watanabue, Tom Ichibha, Kenta Hongo/ RCACI, and Ryo Maezono/School of Information science, JAIST

ABSTRACT:

Phosphorus has been utilized from several centuries for industrial usage such as fertilizers. Recently it was reported that a layer of black phosphorus (BP) can be peeled off from bulk. A single layer of BP is known as Phosphorene and is a 2D material. Phosphorene is also found to have good electronic and opto-electronic properties because of its finite and tunable band gap. However, to utilize phosphorene in electronic devices, it should have strong adhesion, low resistance and good Ohmic contact with metal electrodes. The metal electrodes are generally used to carry the current out of the device. In this study, we have tried to find out the most suitable metal electrode. We evaluated the adhesion strength and electronic conductivity as criteria for a good electrode. We have chosen 20 types of metal such as Au, Pd, Ta, and Ti as possible candidates for the metal electrode. A slab consisting of one layer of metal, one layer of termination (Oxygen or Hydrogen) and three layers of phosphorene is used for the simulation. For each combination of termination and metal, simulation of adhesion strength and electronic property is carried out. The work of separation is employed to estimate the adhesion strength, which is calculated as the interfacial energy divided by per unit area. We performed DFT calculations using QUANTUM ESPRESSO with PBE-GGA exchange-correlation functional and ultra-soft pseudopotential available therein. We investigated the cases of oxygen and hydrogen terminated phosphorene. The termination is considered to strengthen the adhesion and to improve the electronic conductivity.



Besides that, we also estimated the ohmic contact and electric conductivity from the plot of density of states at the Fermi level. In-gap peak of the density of states corresponds to the localized surface electronic states because such a peak is not observed in bulk phosphorene. At the interface of the systems, the appearance of the peak means the existence of localized electronic states around the interface. It is considered that such localized electronic states appear with the electrode having low carrier mobility across the interface. Since these electronic states give rise to electric double layers that are the origin of electric rectification, these in-gap peaks are regarded as the sign of a Schottky contact, otherwise the electric contact nature is Ohmic. From the simulations, it was found that Ti with Oxygen termination has the highest work of separation and there is a trend that work of separation decreases from group 4 elements to group 6 elements in case of oxygen termination. Among those elements

showing high work of separation, group 5 elements show peak in-gap density of states. Considering the work of separation and electric contact, we can conclude that group 5 elements are most suitable for the metal electrodes on black phosphorous devices.

REFERENECE:

- G. A.K. and N. K.S., *Nat. Mater.* 6, 183 (2007).
- D. Jun and X. C. Zeng, *J. Phys. Chem. Lett.* 5, 1289 (2014).
- H. Liu, A. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tomanek, and P. D. Ye, *ACS Nano* 8, 4033 (2014).
- Q. Jingsi, K. Xianghua, H. Zhi-Xin, Y. Feng, and J. Wei, *Nat. Commun.* 5, 4475 (2014).
- I. Tom, H. Kenta, M. I., M. N.W., A. G.O., and M. Ryo, *Diam. Relat. Mater.* 81, 168 (2018).
- P. Yuanyuan, W. Yangyang, Y. Meng, Q. Ruge, Z. Hongxia, Z. S., P. Xiyou, Y. Dapeng, Y. Jinbo, S. Junjie, and L. Jing, *Chem. Mater.* 28, 2100 (2016).
- D. S. Schulman, A. J. Arnold, and S. Das, *Chem. Soc. Rev.* 47, 3037 (2018).

DFT calculations for hybridizations of electron orbitals in P-B pairs embedded in Si nano clusters

School, Lab, Name: Materials school, Mizuta laboratory, Manoharan, Le The Anh

Machine:: CRAY XC40

Nanoscale two-dimensional Si Esaki tunnel diodes has been reported recently [1] with different characteristics compared to bulk Si Esaki tunnel diodes due to the fact that atomistic nature exhibits more clearly at nano scale. For example, the band-to-band tunneling (BTBT) can be assisted by two deep-energy-level P and B of P-B pairs in depletion region [1]. Here we report our calculations to clarify how P and B interact each other at distance smaller than Bohr radius. We found that at such small distance, P and B share their p-orbitals to each other leading to the screening of the potential at both sites. That means P-B pairs do not assist the BTBT. Figure 1 shows the projected density of states (PDOS) at P and B sites with different P-B separations. A P-B pairs was embedded in a large Si cluster which have more than 800 atoms. The solid (dashed) red, green, blue lines are PDOS resolved into s-, d-, and p-orbitals for P (B) atom, respectively. As P-B distance reduces, the hybridization between p-orbitals of P and B increases. The results will be published as part of study about effects supporting/un-supporting BTBT in nanoscale Si tunnel diodes [2].

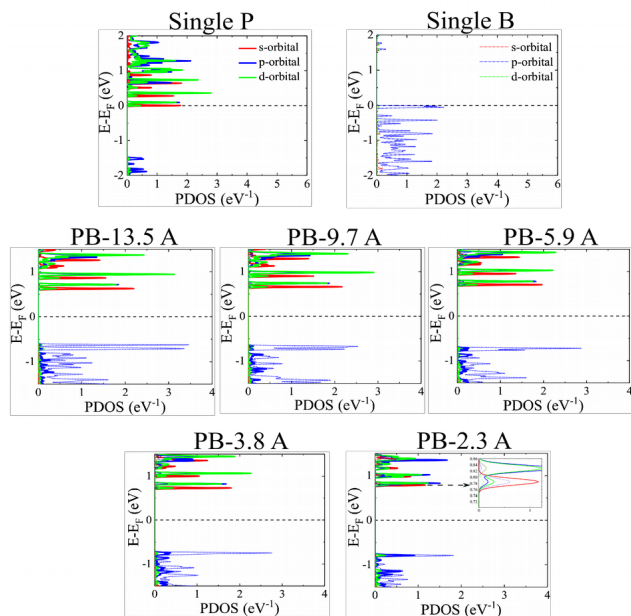


Figure 1. Projected density of states at P (solid) and B (dashed) decomposed into s- (red), p- (blue), and d- (green) orbitals.

Published papers:

- 1) Appl.Phys. Lett. **108**, 093502 (2016)
- 2) Single-electron tunneling via donor clusters in nanoscale Si Esaki tunnel diodes (in manuscript)

First-Principles Simulations Assisted Development of Catalysts in Fuel Cells

University College London
& Chinese Academy of
Science.

Name: Guoliang Chai

Machine: xc40; hpcc

Collaborator: Kiyoyuki
Terakura @ JAIST

Abstract:

Developing cost-effective and high-performance oxygen reduction reaction (ORR) catalysts is a fundamental issue in fuel cells and metal-air batteries. To this aim, carbon materials catalysts (CMCs) are extensively investigated, because of their performance comparable to noble-metal-based catalysts in alkaline solution. Yet, acidic solutions are desirable for an efficient proton exchange across Nafion membranes to yield high power density for commercial applications. However, the ORR performance of CMCs in acidic solutions is rather low, because of undesirable two-electron processes and OH radical formation. By using first-principles simulations, we elucidate the mechanisms and identify the active sites of $2e^-$ ORR processes for indirect $4e^-$ ORR. We provide evidence for the fact that nitrogen-doped Stone–Wales defects in graphene favor an indirect four-electron ORR upon H_2O_2 formation and reduction. The low ORR potential for metal-free CMCs is ascribed to H_2O_2 formation via hydrogen abstraction and the critical point for OH radical generation on transition-metal-based CMCs is 0.82 V. Moreover, we provide an insight into the indirect $4e^-$ ORR, which serves as a guide for suppressing undesired $2e^-$ ORR, avoiding OH production, and promoting direct four electron ORR on CMCs. These results disclose a new strategy for developing high-efficiency ORR on CMCs in acidic solutions.

Published papers:

- 1) Guo-Liang Chai, M. Boero, Z. Hou, K. Terakura, and W. D. Cheng, *ACS Catal.* **2017**, *7*, 7908-7916.
- 2) Guo-Liang Chai, Zhufeng Hou, Takashi Ikeda, and Kiyoyuki Terakura, *J. Phys. Chem. C*, **2017**, *121*, 14524 -14533.

「InSb 及び Sb_2Te_3 の電子状態および光学誘電率の第一原理計算」

石川工業高等専門学校・佐野陽之

使用計算機：SGI UV3000, Cray XC40

<目的>

Sb_2Te_3 や InSb のようなアンチモナイドは超解像光ディスクの機能層材料として用いられている。これらの材料はレーザー光照射によって融解すると光学特性が大きく変化し、それが超解像現象を引き起こす。Blu-ray Disc で用いられている光子エネルギー3.06 eV においては、 Sb_2Te_3 は融解によって光吸収が減少し、InSb は逆に増大することが実験によって確認されている。これらの光学特性変化の起源を調べるために、InSb と Sb_2Te_3 の結晶及び液体状態の電子状態と誘電率の第一原理計算を行う。今年度は主に Sb_2Te_3 の計算結果の分析を行った。

<内容>

本研究の計算には VASP (Vienna ab-initio simulation package) を用いた。 Sb_2Te_3 の液体状態の構造モデルは、235 個の原子からなる MD 計算によって作成した。電子状態計算は、MBJLDA 近似を用い、Spin-orbit coupling 効果を考慮した。誘電率はバンド間遷移を双極子近似で計算し、Drude 項は考慮しなかった。

結晶 Sb_2Te_3 はバンドギャップ 0.15eV の半導体的電子状態を示すが、融解によってフェルミ準位付近の電子状態密度 (DOS) が増大しバンドギャップが消失することが計算によって示された。DOS の観点からは金属的な電子状態への変化が起こっているように見えるが、液体 Sb_2Te_3 の抵抗率の温度係数は負の値を示すことが知られており、液体 InSb のような単純な金属的電子状態とは異なった電子状態が形成されていると考えられる。

Sb_2Te_3 の光吸収が融解によって減少する様子が計算によって定量的に再現できた。複素誘電率・屈折率の解析から、3.06eV における光学遷移は融解によってほとんど変化せず、1.5eV 付近の光学遷移の減少が 3.06eV の光吸収の減少を引き起こしていることが分かった。また、結晶 Sb_2Te_3 は 1.5eV 付近に大きな光学遷移をもつ半導体的電子状態を示すのに対し、結晶 InSb はより高エネルギー側の 4eV 付近に大きな光学遷移を持っている。この違いが融解による光吸収変化の違いの原因と考えられる。

なお本研究は、JAIST マテリアルサイエンス研究科の水谷教授との共同研究に基づいて実施した。

<研究業績等> 本研究に関連する国際会議および国内学会発表等を以下に示す。

- 1) H. Sano, M. Kuwahara, G. Mizutani, “First principles study of optical properties change of Sb_2Te_3 due to the melting”, International Symposium on Imaging, Sensing, and Optical Memory 2017 (ISOM' 17), Mtsue, Shimane, Japan, October 22-25, 2017.
- 2) 佐野陽之、桑原正史、水谷五郎, “融解による Sb_2Te_3 の光学特性変化の第一原理計算”, 応用物理学会 2017年9月7日 (福岡国際センター) 7a-PA3-11.
- 3) H. Sano, M. Kuwahara, G. Mizutani, “Ab initio calculation of optical properties change of antimonide due to the melting”, 第29回相変化研究会シンポジウム (PCOS2017) 2017年11月16-17日 (熱海ニューフジヤホテル、熱海) (invited)

<関連取得研究費>

- 1) 科研費基盤研究 (C) 「ナノサイズ光学窓の形成による超解像効果発現の最適条件の理論的探索 平成27年度~30年度、研究代表者：佐野陽之

MU-MIMO システムのための低演算量 LS ターボチャネル推定法

神戸大学工学研究科 高野泰洋

使用計算機 pcc

研究概要

ターボ受信フレームワークは、Multiuser (MU) Multiple-input multiple-output (MIMO) 通信システムにおける多ユーザ干渉 (MUI) 問題に対し、最も有望な解決策の一つを提供する。ターボチャネル推定は、トレーニング系列 (TS) と送信信号のソフトレプリカを同時に利用することで推定精度の向上が可能である。しかし、ソフトレプリカの精度を考慮した最尤推定法を実現するために、従来手法は演算量オーダー $\mathcal{O}(\kappa^3 N_T^3 N_R^3)$ を必要としていた。但し、 (κ, N_T, N_R) はそれぞれ (システム定数, 送信アンテナ数, 受信アンテナ数) である。これは、Least squares (LS) 規範で形式化されるターボチャネル推定が $\kappa N_T N_R \times \kappa N_T N_R$ の逆行列を計算するためである。しかし、多数の送受信アンテナを想定する MU-MIMO システムでは、演算量が膨大になるため、従来手法は実現困難である。近似アルゴリズムにより演算量を削減するアプローチも知られていたが、ターボ受信機の Bit error rate (BER) 収束特性が劣化するという問題があった。

そこで本研究は、MU-MIMO システムのための高速な LS ターボチャネル推定アルゴリズムを提案した。具体的には、ターボチャネル推定問題の中で形式化される共分散行列の代数的な特徴に注目し、演算精度を損なうことなく、受信アンテナ数に独立な演算量オーダー $\mathcal{O}(\kappa^3 N_T^3)$ で実行可能な最尤推定法を示した。また、近似アルゴリズムを利用した場合に比べ、本提案を利用することでターボ受信機の BER 収束性能が向上することを検証した。なお、基準となる従来手法は、演算量 $\mathcal{O}(\kappa^3 N_T^3 N_R^3)$ を必要とするため、シミュレーション検証には長時間を要するが、並列計算機を利用することで、効率的に性能評価を実施することができた。

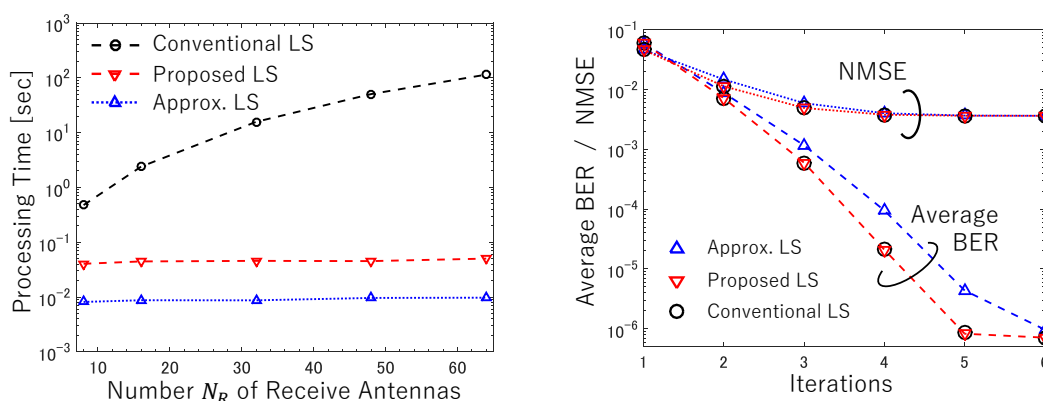


Figure 1 演算時間と NMSE/BER 収束性能

研究業績

- [1] Y. Takano, H. J. Su, "A low-complexity LS turbo channel estimation technique for MU-MIMO systems," *IEEE Signal Proc. Lett.*, vol. 25, no. 5, pp. 710-714, May 2018.

5. 謝辞

JAIST の並列計算機利用者メーリングリストである MPC メーリングリストを通じて各計算機利用者へ報告書の作成を依頼し，これに応じて頂いた各著者のご厚意によって，本報告書を取りまとめることができました。

ご多忙のところ，報告書の作成にご協力を頂いた著者各位に心から感謝いたします。