

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2021
Author(s)	本郷, 研太; 宮下, 夏苗; 井口, 寧
Citation	Technical memorandum (School of Information Science, Graduate School of Advanced Science and Technology, Japan Advanced Institute of Science and Technology), IS-TM-2022-001: 1-50
Issue Date	2022-10-06
Type	Others
Text version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/10119/18043
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 2021

本郷 研太, 宮下 夏苗, 井口 寧 編
2022 年 10 月 6 日
IS-TM-2022-001

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、2021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 9

物質科学シミュレーションとマテリアルズ・インフォマティクス
本郷研太

Ab initio exploration of BCS-type superconductors for ThCr₂Si₂-type compounds
Kenji Oqmhula

First-principles investigation of the electronic and mechanical properties of metal contacts to two-dimensional semiconductors toward next-generation electronic devices
Abdul Ghaffar

第一原理拡散量子モンテカルロ法による力の計算
中野晃佑

Diffusion Monte Carlo Study on Relative Stabilities of Boron Nitride Polymorphs
Nikaido Yutaka

Benchmarking Calculations for binding energy of the G2 Set molecules using quantum Monte Carlo
Abhishek Raghav

Application of canonical augmentation to the atomic substitution problem
Genki Imam Prayogo

Information-scientific structure search for ternary hydride high-temperature superconductors
Song Peng

Interface Engineering of PN heterojunction for SnS based Thin-film solar cell
Rohit Dahule

共有計算サーバー使用成果報告書
井口寧

3d遷移金属元素で構成される等モル量4元系合金の規則-不規則競合協調関係
水関博志

AB Initio Investigation on thermodynamics and microkinetics of chemical process on surfaces/interfaces for green-energy applications
Mohammad Kemal Agusta

Activity Report of FY2021
Mohaddeseh Abbasnejad

Understanding the phase stability of oxides in the context of fine tuning their functional properties including role of plasmonic properties of nitrides - a combinatorial approach based on computations and experiments.

Niraja Moharana

First-Principles Molecular Dynamics study on structure, properties and plasticity mechanism of $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ binary glass

YANG Yuting

3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバー利用研究 36

分子シミュレーションを活用した糖鎖の立体構造の揺らぎの解析

山口拓実

自己無撞着フォノン計算による Ag-P 化合物中の Ag 原子の非調和振動の研究

宮田全展

機械学習による Ziegler-Natta 触媒一次粒子の非経験的構造決定と構造的な性能相関解明

高棹玄德, 谷池俊明

ナノ触媒の非経験的構造決定を目的とした機械学習ポテンシャルの構築

筑間弘樹

Calculation on interaction enthalpy of hydrogen bond between polybenzazole molecular chains

ZHONG Xianzhu

ポリイミドの耐熱性と酸素透過率の量子化学論的予測に関する研究

只木哲

相変化材料を用いた光スイッチの相変化状態制御に関する研究

佐野陽之

分子動力学シミュレーションを用いたヘロナミド類の膜内構造と結合特性

齋藤大明

Capturing Concentration Induced Aggregation of Nucleobases on Graphene Surface Through Polarizable Simulations

Sairam Swaroop Mallajosyula

4. 知識科学分野の計算サーバー利用研究 46

The Impact of Virtual Reality on Gaming Experience: A Perspective from Half-Life on Steam

YU Fangyu

Esports Game Updates and Player Perception: Data Analysis of PUBG Steam Reviews

YU Yang

1. JAIST における共有計算サーバ環境

1.1 概要

北陸先端科学技術大学院大学(JAIST)は、最先端の教育研究活動を支える研究基盤として全学共同利用な計算サーバ群を提供している。各ユーザの研究活動に応じて、その目的達成に資するためには、柔軟な運用形態が求められる。情報社会基盤研究センター(以下情報センター)はソフト・ハード両面の保守業務を担っているが、ユーザー目線での運用を実現するために、情報センターとは独立な組織として「MPC グループ」と「MPC 管理グループ」が存在し、三者の親密な連携の上に運用されている。MPC グループは共有計算サーバのユーザーから構成され、MPC 管理グループはその有志から構成される。MPC グループの登録ユーザーは、mpc メーリングリストを通じて、「計算機リソースやキュークラスに関する要望」や「各種共用ソフトウェアの利用に関する質問」など計算機利用に関する質問・要望を広く発言できる。MPC 管理グループは、ユーザの質問・要請に応え、キュークラス設定やリソース配分の具体案を提案し、ユーザー間の調整を行う。その提案に従い、情報センターが随時、設定を更新していく。情報センターと MPC グループ・MPC 管理グループの詳細は文献[9,10]を参照されたい。

1.2 既設・新規導入・更新システム

JAIST 共有計算サーバ環境は、超並列計算機と汎用 PC クラスタ計算機から構成される。前者は、科学技術計算などの HPC(High Performance Computing)利用を想定し、後者は、計算機を利用した教育研究の多様化に応じて、標準的な CPU 計算機だけではカバーしきれないニーズにも対応できるように、PC クラスタの一部では大規模メモリや GPU を搭載している。2021 年度の計算サーバの概要を表 1 に示す。

今年度のハードウェアに関する変更点として、2022 年 2 月に、汎用/GPGPU クラウドノード(vpcc)がリースアップとなった。昨今の AI(人工知能)ブームを背景に、深層学習に代表される機械学習や AI の開発・計算環境として、GPU 計算機を利用するユーザーが本学でも急増した(図 1)。この GPU 需要の急増に伴い、GPGPU 機のリソース不足が深刻な問題となっていた[20]。そこで、情報環境システム仕様策定委員会での議論を経て、vpcc 更新システムとしては、汎用ノードを廃止して、GPGPU ノードのみの構成とすることが決定した。2022 年 3 月に更新されたシステムは、NVIDIA A100 系ノード 10 台と A40 系ノード 20 台から構成されており(2 GPU/node)、単純に GPU 台数だけを比較しても、vpcc における 16GPU から 60 GPU と大幅に増加し、本学における計算機資源の需要に応えられる構成になったと期待される。なお、当該システムは、昨年度導入した KAGAYAKI システム(図 2)とフロントエンドを共有しており、同一のログインノードからジョブを投入することが可能となった。

表 1. JAIST で利用可能な計算サーバ(2021)

超並列計算機(分散メモリ型)	
ノード種類(ホスト名)	主な仕様
大規模並列計算ノード (kagayaki)	分散メモリ・スカラー型システム(280-node/35840-core): Dell PowerEdge R6525 総理論演算性能: 1.48PFLOPS 作業用データ領域: 200TB (Lustre) ノード構成 CPU: AMD EPYC 7H12 2.6GHz (64-core×2) Memory: 512GB (32GB DDR4/3200 SDRAM×16) 開発環境(Fortran/C/C++) GNU/Intel OpenAPI/AOCC 運用期間 2021年3月1日～2026年2月28日(予定)
汎用 PC クラスター計算機	
ノード種類(ホスト名)	主な仕様
大容量メモリノード (Impcc)	Large Memory Node-S (1-node/144-core): HPE Superdome Flex CPU: Intel Xeon G-6240M 2.6GHz (18-core)×8 Memory: 12TB Large Memory Node-l (1-node/72-core): HPE ProLiant DL560 CPU: Intel Xeon G-6140 2.6GHz (18-core)×4 Memory: 6TB Large Memory Cluster (30-node/1920-core): HPE ProLiant DL560 CPU: Intel Xeon G-6242 2.8GHz (16-core)×4 Memory: 1.5TB 開発環境(Fortran/C/C++) GNU/PGI Compiler/Intel Parallel Studio XE 運用期間 2019年3月1日～2023年2月28日(予定)
汎用クラウドノード (vpcc)	PC クラスタ(48-node/1536-core): Fujitsu Primergy CX2560 M4 CPU: Intel Xeon Gold 6130 2.10GHz (16-core)×2 Memory: 64GB 開発環境(Fortran/C/C++/Python) GNU/PGI Compiler, Intel Parallel Studio XE, Anaconda Python 運用期間 2018年3月1日～2022年2月28日(予定)
GPGPU クラウドノード (vpcc)	GPU ノード(8-node/16-GPU): Fujitsu Primergy CX2570 M4 CPU: Intel Xeon Gold 6130 2.1GHz (16-core)×2 GPU: NVIDIA Tesla P100×2 開発環境(Fortran/C/C++/Python) GNU/PGI Compiler, Intel Parallel Studio XE, CUDA, Anaconda Python 運用期間 2018年3月1日～2022年2月28日
GPU ノード (kagayaki)	GPU Node 1 (10-node): Dell PowerEdge R750 CPU: Intel Xeon Gold 5329 2.2GHz (26-core×2) Memory: 512 GB GPU: NVIDIA A100 x 2 GPU Node 2 (20-node): Dell PowerEdge R750 CPU: Intel Xeon Gold 5329 2.2GHz (26-core×2) Memory: 512 GB GPU: NVIDIA A40 x 2 開発環境(Fortran/C/C++/Python) GNU Compiler, Intel OneAPI, Anaconda Python 運用期間 2022年3月1日～2026年2月29日(予定)

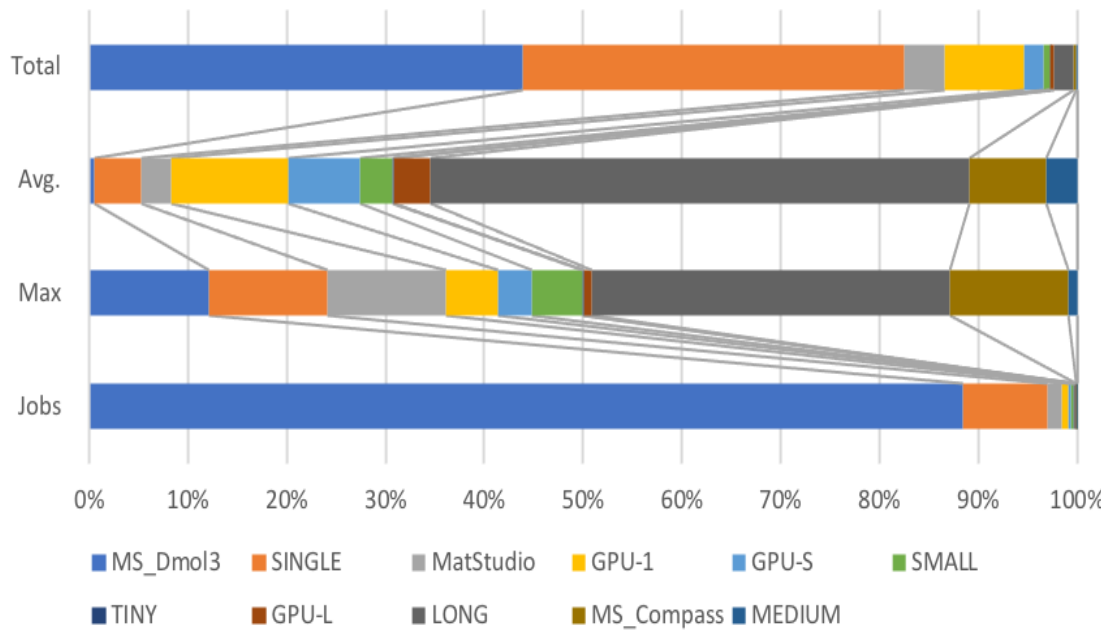


図 1. vpcv キュー種別利用比率(2019Dec-2020Nov, 年間の総実行時間/平均時効時間/最大実行時間/ジョブ数)



図 2. HPC System "KAGAYAKI"

1.3 アプリケーションソフトウェア

上記プラットフォームに対して、利用可能なアプリケーションソフトウェアを表 2 に示す。マテリアルサイエンス系の科学技術計算ソフトウェアとしては、Gaussian16/GaussView, 及び Materials Studio の商用ソフトウェアを利用することができる。これらのソフトウェアは CPU 計算機上で並列計算として実行することができる。データ科学・機械学習などのソフトウェアとしては、商用ソフトウェアとしては MATLAB が利用可能であり、深層学習のためのコンテナ環境として、Tensorflow, Caffe, 及び Chainer を利用することができる。深層学習は、CPU・GPU 両計算機上で実行することができる。

表 2. 各種ソフトウェアとプラットフォームの対応表(2021)

ソフトウェア	概略	kagayaki	Impcc	vpcc(CPU)	vpcc(GPU)
Gaussian 16	Gaussian 社製の量子化学計算パッケージ	○	○	○	—
GaussView	Gaussian 社製の Gaussian 専用可視化ソフト	○	○	○	—
Materials Studio	BIOVIA 社製の材料開発統合シミュレーションソフトウェア	—	○	○	—
MATLAB	MathWorks 社製の数値解析ソフトウェア	○	○	○	○
Tensorflow (コンテナ環境)	Google 社製の機械学習ソフトウェアライブラリ	○	○	○	○
Caffe (コンテナ環境)	UCB 開発の深層学習フレームワーク	○	○	○	○
Chainer (コンテナ環境)	Preferred Networks 開発の深層学習フレームワーク	○	○	○	○

1.4 2021 年度の活動

2021 年度の JAIST 共有計算サーバ環境に関連する主な活動について述べる。例年、各種計算機の新規利用者開拓(オリエンテーション)、各種計算機利用者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(各種初級者講習会)を企画している。今年度は、感染対策に関する本学対応方針に従い、春期講習会は完全にオンライン開催とし、秋期講習会は、オンサイト参加者数を制限しながら、ハイブリッド開催とした。今年度に開催した講習会の一覧を表 3 に示す。オリエンテーションでは、新入生や新規利用者を対象として、本学共有計算機の構成や初歩的な利用方法を解説した後に、ハンズオントレーニングを実施している。ハンズオントレーニングは、GUI 環境しか利用経験のないユーザーに対して、CLI 環境利用への心理的障壁を多少なりとも緩和し、本学での研究活動に向けて各種計算機の円滑利用を目的としている。そこで、Linux コマンド操作から始めて、ファイル編集、プログラムコンパイル、ジョブ投入といった計算機上での一連の作業を体験し、また本学で利用可能な科学技術計算ソフトウェアについても簡単な実習を含めた講習内容となっている。

システム毎の講習会では、ログインからジョブ投入など初心者向けの内容から、MPI の理論と

実行など中級者向けの内容まで、利用者のレベルに応じたテーマを用意している。2021年度は、データ科学・機械学習・の研究開発プラットフォームとして、Python環境の構築と利用を念頭に、前半は初級者向けの基本事項を提供し、その上で、後半は Singularity コンテナを用いた実践的な利用方法を提供した。特に GPU は一般的にドライバやライブラリ、ソフトウェアのバージョンアップに応じて実行環境を頻繁に構築しなおさなくてはならない状況が発生しやすく、コンテナの利用がこのような状況に対する有効な解決策として期待される。コンテナを利用した上で複数ノードのリソースを MPI 経由で使用する手法は、簡易な手順で実行パフォーマンスを底上げできる利便性の高いものと考えられる。今後も、利用状況と利便性の向上に向けた各種講習会を企画することで、新規利用者の拡大と効率的利用に取り組んでいく。

表 3. 2021 年度に開催した講習会

開催月	講習会
2021年6月16日	大規模計算機利用オリエンテーション
2021年6月22日	計算機講習会 [Large Memory PC Cluster] ～ 機械学習/画像検出のコンテナ実装～
2021年6月25日	計算機講習会 [PC Cluster] ～ 初心者向け conda/コンテナことはじめ～
2021年7月2日	計算機講習会 [KAGAYAKI] ～ 大規模計算機/MPI 並列導入編～
2021年10月26日	大規模計算機利用オリエンテーション
2021年11月1日	計算機講習会 [基本編+Python 編] ～ Python/Conda, Jupyter Notebook～
2021年11月4日	計算機講習会 [Large Memory PCC/コンテナ活用編] ～ 画像処理をサンプルに～
2021年11月8日	計算機講習会 [MPI+アプリケーション編] ～ Matlab, Gaussian～

1.5 まとめと今後の導入計画

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 2020」は 2020 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 15 件、材料科学分野から 9 件、知識科学分野から 2 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、展開していく上での強力な研究基盤として、計算機の重要性は激増している。システム利用状況の把握は、これまで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、新規利用実績のある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。特に、昨年度導入の KAGAYAKI システムの CPU ノードに、今年度導入の GPU ノードが加わることで、従来のハイパフォーマンス・コンピューティング(HPC)研究分野のみならず、AI・機械学習系研究分野にも包括する計算機環境を整備することができた。KAGAYAKI システムが、本学における HPC・AI・機械学習研究発展の大きな原動力となることを期待する。

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・情報科学系 テクニカルメモランダム, IS-TM-2018-001, (2018).
- [18] 本郷 研太, 辻 誠樹, 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 2017”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム, IS-TM-2018-002, (2018).
- [19] 本郷 研太, 辻 誠樹, 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 2018”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム, IS-TM-2019-001, (2019).
- [20] 本郷 研太, 辻 誠樹, 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 2019”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム, IS-TM-2020-001, (2020).

[21] 本郷 研太, 辻 誠樹, 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 2020”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム, IS-TM-2021-001, (2021).

2. 情報科学分野の計算サーバ利用研究

今年度は、本学計算機群を利用した研究成果として、13件の原著論文を報告した。特に、第一原理計算を活用したデータ駆動型構造探索手法により、新規高温超伝導体を多数発見すると共に、金属水素の新しい高温相の発見に成功した。新学術領域「複合アニオンの創製」に関する共同研究プロジェクトで、4件の原著論文を報告している。層状ペロブスカイト構造や触媒材料を対象とした第一原理電子状態計算を実施し、当該物質系の機能発現機構を計算科学の観点から解明した。当該計算では、主として、vpcc/Impcc にインストールされている CASTEP、及び、KAGAYAKI 上にインストールされている VASP/Quantum Espresso を利用した。また、今年度は、第一原理計算だけではなく、マテリアルズ・インフォマティクス研究において、本学並列計算機群を利用した研究成果が得られている。

研究業績(原著論文・査読あり)

- 1) R. Dahule, C. C. Singh, K. Hongo, R. Maezono, E. Panda, "Anomalies in the bulk and surface electronic properties in SnS: Effect of native defects", *J. Mater. Chem. C*, **2021** 10, 5514-5525.
- 2) P. Song, Z. Hou, P. B. d. Castro, K. Nakano, K. Hongo, Y. Takano, R. Maezono, "High-pressure Mg-Sc-H phase diagram and its superconductivity from first-principles calculations", *J. Phys. Chem. C*, **2021** 126, 2747-2755.
- 3) A. T. Hanindriyo, A. K. S. Yadav, T. Ichibha, R. Maezono, K. Nakano, K. Hongo, "Diffusion Monte Carlo evaluation of Disiloxane linearization barrier", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2021** 24, 3761-3769.
- 4) P. Song, Z. Hou, P. Baptista d. Castro, K. Nakano, Y. Takano, R. Maezono, K. Hongo, "The systematic study on the stability and superconductivity of Y-Mg-H compounds under high pressure", *Adv. Theory Simul.*, **2021** 5, 2100364.
- 5) T. Ichibha, Y. Zhang, K. Hongo, R. Maezono, F. A. Reboredo, "Candidate structure for the H₂-PRE phase of solid hydrogen", *Phys. Rev. B*, **2021** 104, 214111.
- 6) P. Song, Z. Hou, P. B. d. Castro, K. Nakano, K. Hongo, Y. Takano, R. Maezono, "High-*T*_c superconducting hydrides formed by LaH₂₄ and YH₂₄ cage structures as basic blocks", *Chem. Mater.* **2021** 33, 9501-9507.
- 7) Y. Kitagawa, J. Ueda, K. Fujii, M. Yashima, S. Funahashi, T. Nakanishi, N. Takashi, T. Hiroaki, K. Hongo, R. Maezono, S. Tanabe, "Site-selective Eu³⁺ Luminescence in Monoclinic Phase of YSiO₂N", *Chem. Mater.*, **2021** 33, 8873-8885.
- 8) G. I. Prayogo, H. Shin, A. Benali, R. Maezono, K. Hongo, "Importance of van der Waals interactions in hydrogen adsorption on a silicon-carbide nanotube revisited with vdW-DFT and quantum Monte Carlo", *ACS Omega*, **2021** 33, 8873-8885.
- 9) J. Zhang, K. Ishizuka, M. Tomitori, T. Arai, K. Hongo, R. Maezono, E. Tosatti, Y. Oshima, "Peculiar Atomic Bond Nature in Platinum Monatomic Chains", *Nano Lett.*, **2021** 21, 3922-3928.
- 10) S. Yoshio, K. Hongo, K. Nakano, R. Maezono, "High-Throughput Evaluation of Discharge Profiles

of Nickel Substitution in LiNiO₂ by Ab Initio Calculations", *J. Phys. Chem. C*, **2021** 125, 14517-14524.

- 11) S. Ju, R. Yoshida, C. Liu, S. Wu, K. Hongo, T. Tadano, J. Shiomi, "Exploring diamondlike lattice thermal conductivity crystals via feature-based transfer learning", *Phys. Rev. Materials*, **2021** 5, 053801.
- 12) R. Dahule, A. Raghav, A. T. Hanindriyo, K. Hongo, R. Maezono, E. Panda, "Surface Study of Cu₂SnS₃ Using First-Principles Density Functional Theory", *Adv. Theory Simul*, **2021** 4, 2000315.
- 13) K. Utimula, G.I. Prayogo, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono, "Stochastic Estimations of the Total Number of Classes for a Clustering having Extremely Large Samples to be Included in the Clustering Engine", *Adv. Theory Simul*, **2021** 4, 2000301.

学会発表実績

- 1) 「機械学習による XRD パターン認識」, 本郷研太, 2022 年年会 公益社団法人日本セラミックス協会, オンライン開催, 2022 年 3 月 11 日.
- 2) 「XRD スペクトルピークの機会学習的識別」, 本郷研太, 新物質研究会 2022-ハイエントロピー効果や機械学習を取り入れた物質開発-, 北海道大学, Mar 3, 2022.
- 3) " Diffusion Monte Carlo simulations applied to noncovalent systems", Kenta Hongo, The 24th International Annual Symposium on Computational and Engineering, online, Apr 28, 2021.

研究費獲得実績

- 1) 平成 31 年度科研費・基盤研究 (C)、「分子理論・計算科学・データ科学の融合によるハマカー定数の自律型予測モデルの開発 (研究代表/19K05029)」, R3 年度 700 千円 (H31 年 4 月~R5 年 3 月).
- 2) 令和 4 年度科研費・基盤研究 (B) (一般)、「水分散系における高分子の移流集積界面分割モデルの設計 (研究分担/研究代表者: 桶葭 興資/21H01998)」, R3 年度 500 千円 (R3 年~R6 年) .
- 3) 令和 4 年度科研費・基盤研究 (C) (一般)、「第一原理量子モンテカルロ法を用いた層状物質に対する第一原理フォノン計算の実現 (研究分担/研究代表者: 前園 涼/ 21K03400)」, R3 年度 300 千円 (R3 年~R5 年) .

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

***Ab initio* exploration of BCS-type superconductors for ThCr₂Si₂-type compounds**

PRINCIPAL INVESTIGATOR: Kenji Oqmhula

AFFILIATION: Hongo Lab. JAIST, Nomi, Ishikawa, Japan

ADDRESS: 1-1 Asahidai, Nomi, Ishikawa 923-1292 Japan

PHONE: +81-761-51-1301

EMAIL: mwkokk1907@icloud.com

WEBPAGE: None

MACHINE USED: (kagayaki/vpcc)

2. PROJECT DESCRIPTION:

ランタン水素化合物や Ce 系金属化合物といった BCS 型超伝導体の枠組みで相対的に高い超伝導転移温度(T_c)を有する化合物が最近新たに発見されている。そのため、BCS 型超伝導体の探索研究が再び勢力的に行われている。第一原理フォノン計算と Allen-Dynes 式を組み合わせた理論的 T_c 予測は、BCS 型超伝導体の探索を加速させるとして注目が集まっている。しかしながら、膨大な候補化合物に対するハイスループット計算は、計算資源の観点から困難であると考えられる。そこで、我々は初めに無機結晶構造データベースに登録されている Th₂Cr₂Si₂ 系の 1883 化合物を初期候補に設定した。この化合物群から経験的指標と構造安定性に基づく絞り込みを行った。まず、BCS 型超伝導体に望ましくないと考えられる磁気秩序構造を持つ 1761 化合物を候補から除外した。さらに、絞り込まれた 122 化合物に対する第一原理フォノン計算から動的に不安定な結晶構造を有する 52 化合物を除外した。残った 70 化合物に対して、第一原理 T_c 算定を行った。この内、30 化合物に対しては T_c 実験値が報告されており、40 構造に関して実験値が報告されていない。

T_c 予測精度を評価するため、対象系の 70 化合物のうち、実験値が報告されている 30 化合物の実験値と T_c 予測値を比較した。 T_c 予測値と実験値は良い一致(RMSE=1.17 K)を示したことから、第一原理 T_c 計算の予測精度は良いと考えられる。妥当性が示された T_c 予測計算をさらに、実験値が報告されていない 40 化合物に対して適用した。これらのうち、BaCd₂Ge₂ が最も高い T_c 予測値を示した。 T_c 計算対象の全 70 化合物のうち、 T_c 予測値が最も高い LaRu₂As₂ について、さらに T_c 値に寄与する電子/フォノン性質を調べた。 T_c 算定に用いた Allen-Dynes 式から、 T_c 値にはフェルミ面上の電子状態密度(N_F)、フォノン周波数の対数平均(ω_{\log})、電子-フォノンカップリング定数(λ)が寄与する。この内、LaRu₂As₂ では、 N_F と ω_{\log} の値は T_c 予測値が相対的に低い他の化合物とあまり変わらない値を示した。一方で、 λ は他の化合物よりも顕著に高い値を示した。そこで、フォノン状態密度と λ のフォノン周波数依存性を比較し、高い λ 値に寄与するフォノンモードを調べた。両者の比較結果から、Ru 原子の低周波数フォノンモードが LaRu₂As₂ の高い λ の値に寄与していることが分かった。今後、LaRu₂As₂ の Ru 原子のフォノンモードの原子変位と T_c 値の関係性、実験値が報告されていない BaCd₂Ge₂ の電子/フォノン性質について考察する予定である。

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Maezono Ryo /School of information science.
- Associate Prof. Hongo Kenta/ School of information science.
- Assistant Prof. Kousuke Nakano/ School of information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [3].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [5].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2021 USING JAIST FACILITIES

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2022 USING JAIST FACILITIES

- Study on the structure robustness for electrochemical reaction of cobalt hydroxide
- Computational research for the aggregation mechanism of amyloid beta dimer
- *In-vitro* and *in-silico* based development of DNA Aptamers for A β -42 conformers
- *Ab initio* exploration BCS-type super conductors for ThCr₂Si₂-type compounds
- Thermodynamical phase diagram calculation for Fe-Ni alloy using machine learning potential

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1]"Structure robustness for electrochemical reaction of cobalt hydroxide",
[Ryo Maezono, Kenta Hongo], [journal (temporary)]
- [2]"Study on the structure robustness for electrochemical reaction of cobalt hydroxide",
[Ryo Maezono, Kenta Hongo], [journal (temporary)].
- [3]"Computational research for the aggregation mechanism of amyloid beta dimer",
[Ryo Maezono, Kenta Hongo], [journal (temporary)].
- [4]"*Ab initio* exploration BCS-type super conductors for ThCr₂Si₂-type compounds",
[Ryo Maezono, Kenta Hongo, Kousuke Nakano], [journal (temporary)].
- [5]"Thermodynamical phase diagram calculation for Fe-Ni alloy using machine learning potential",
[Ryo Maezono, Kenta Hongo, Kousuke Nakano], [journal (temporary)].

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

First-principles investigation of the electronic and mechanical properties of metal contacts to two-dimensional semiconductors toward next-generation electronic devices

PRINCIPAL INVESTIGATOR: Abdul Ghaffar

AFFILIATION: Doctoral student (D2), Hongo Lab

ADDRESS: 1-1 Asahidai, Nomi, Ishikawa 923-1292 Japan

PHONE: +81-761-51-1301

EMAIL: mwkabd2101@icloud.com

WEBPAGE:

MACHINE USED: kagayaki

2. PROJECT DESCRIPTION:

Two-dimensional (2D) materials have attracted considerable attention from the scientific community due to their excellent electronic, mechanical, and optical properties. In practice, several 2D semiconductors have been utilized as field-effect transistor (FET) prototype devices, exhibiting the potential to transform the electronic industry. However, one of the major roadblocks to realizing the 2D semiconductor-based FETs is the high contact resistance emerging from the semiconductor-metal (SM) contact interfaces. Computational approaches based on density functional theory (DFT) have been widely used to predict the interface properties of different SM contacts. Previous studies have been found to assert the fact that intrinsic chemical properties of the metals (work function, resistivity, adhesion strength, etc.) cannot be directly used to infer the contact resistance of the SM interfaces. Due to their different chemical nature, they behave differently upon making the contact with semiconductors. As a result, it is quite difficult to select an optimal electrode metal for FET applications. We will use DFT to investigate the interface chemistry and its influence on the contact resistance for a set of metals demonstrating varying chemical properties with 2D semiconductors such as phosphorene and transition metal dichalcogenides (TMDs), especially WS_2 . Furthermore, we will focus on engineered contact interfaces to achieve better contact properties. The engineered methods consist of carefully selecting the adequate adatom-doping and figuring out the optimal defect strategy to improve the SM contact properties.

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Kenta Hongo/Research Center for Advanced Computing Infrastructure
- Ryo Maezono/School of Information science

A/How many co-authored publications with JAIST faculties so far [01].

B/How many co-authored publications with JAIST faculties are planned in the future [02].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2021 USING JAIST FACILITIES

1. [1] Ghaffar, A.; Ganeriwala, M.D.; Hongo, K.; Maezono, R.; Mohapatra, N.R. Insights into the Mechanical and Electrical Properties of a Metal–Phosphorene Interface: An Ab Initio Study with a Wide Range of Metals. *ACS Omega* 2021, 6, 7795-7803.

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2022 USING JAIST FACILITIES

A THEORETICAL APPROACH TO UNDERSTANDING THE NATURE OF VARIOUS DEFECT-ASSISTED WS₂-METAL INTERFACES

Electronic industries have spent a lot of resources and efforts to lower the power consumption from electronic devices ever since the first transistor was fabricated. Nonetheless, it has been established that 2D semiconductor-based devices have the potential to pave the way for achieving low power-consuming devices. However, the research on 2D semiconductor-based FETs is still in its infancy. Transition Metal dichalcogenides (TMDs) such as WS₂, WSe₂, MoS₂, etc. are found to show the capability to be used in the miniaturization of next-generation field-effect transistor (FET) devices attributing to their finite bandgap, tunable electronic properties, and high surface to volume ratio. As a result, it is of prime importance to study the nature of semiconductor-metal contact interfaces and understand the different contact strategies to enhance the properties of novel device applications. Our theoretical study on the same could guide further experimental research by providing a consistent picture of the different metal-semiconductor contact properties.

PHASE ANALYSIS OF BISMUTH USING STATE OF THE ART, HIGHEST ACCURACY, COMPUTATION CODE, QMC

In this work, using the highest accuracy computational code, we will be performing the phase analysis of the Bismuth. Herein, quantum monte Carlo (QMC) simulations will be carried out using the QMCpack tool. The results obtained from this sort of calculation are capable to include the correlation effect which is beyond the scope of the generally used first-principles-based density functional theory framework. Using the QMC-based approach, we can get highly accurate enthalpies of different bismuth phases over a range of pressure, which will in turn enable us to generate a very accurate phase diagram of bismuth. Recent studies suggest that in the pressure range of 2.5-2.8 GPa, there might exist at least two more phases. However, traditional theoretical models, usually fail to distinguish the phase differences occurring in a very low-pressure range. We believe that in this study we can explain the unusual behavior of bismuth between the pressure range of 2.5 to 2.8 GPa and figure out the still unknown phases in the same range.

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1] 'A theoretical study of defect-assisted metal-WS₂ Interfaces (temporary)', [Abdul Ghaffar, Nihar R. Mohapatra, Kenta Hongo, and Ryo Maezono], [Journal (temporary)].
- [2] 'Phase Analysis of Bismuth using DMC Framework', [Abdul Ghaffar, Ryo Maezono, Fernando A Reboredo, Ichiba Tomohiro, Kenta Hongo], [Journal (temporary)].

第一原理拡散量子モンテカルロ法による力の計算

情報科学系, 環境・エネルギー領域

前園研究室 助教 中野 晃佑

使用計算機:KAGAYAKI

概要

第一原理量子モンテカルロ法は、モンテカルロ法を利用して多体シュレーディンガー方程式を数的に解くことで物質の電子状態を解く方法であり、現在の電子状態計算手法の内でも最厳密解に近い解が得られる手法である。SISSA(イタリア)を中心とする国際的な研究グループは、第一原理量子モンテカルロ法を実装した TurboRVB^[1]の開発を行っており、筆者はその主開発者の1人である。今年度、筆者らは、第一原理拡散量子モンテカルロ法に基づく原子に働く力の計算手法を TurboRVB に実装し、そのベンチマーク計算を行った^[2]。図 1a は、拡散量子モンテカルロ法を CO ダイマーに適用して得た、CO 結合距離に対するエネルギー、及び原子に働く力をプロットした図である。エネルギーの微分値と原子に働く力が一致しており、原子に働く力が正確に計算できていることを示す。また、本研究では、第一原理量子モンテカルロ法に基づく力の計算においては、その計算コストを削減するために、Space-warp coordinate transformation 法 (SWCT 法)を適用することが重要であることを見出した。SWCT 法を適用しない場合、力の計算コストが原子番号に比例して急激に悪化する一方、SWCT 法を適用するとその計算コストの増大を抑制できることを発見した (図 1b)。

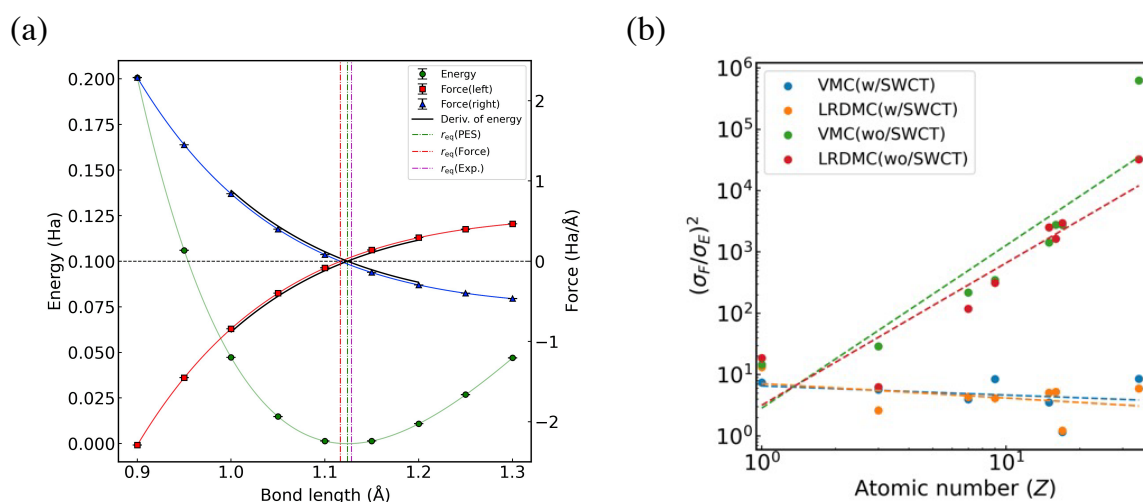


図 1 (a) 拡散量子モンテカルロ法を CO ダイマーに適用して得た、CO 結合距離に対するエネルギー(左軸)、及び原子に働く力(右軸)をプロットした図。エネルギーの微分値(黒実線)と原子に働く力(赤、及び青実線)が一致しており、原子に働く力が正確に計算できていることを示す。(b) 8つの等核二量体において、原子に働く力とエネルギーの計算コストの比(一定の計算コストで得られる統計誤差)を、SWCT 法あり/なしで評価したもの。横軸は原子番号。SWCT 法を適用すると、その比がほぼ一定となること(=エネルギー計算コストと力計算コストの計算量オーダーが同等であること)を示している。

発表論文

[1] K. Nakano, et al. *J. Chem. Phys.* **152**, 204121 (2020). [2] K. Nakano, et al. *J. Chem. Phys.*, **156**, 034101 (2022).

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

DIFFUSION MONTE CARLO STUDY ON RELATIVE STABILITIES OF BORON NITRIDE POLYMORPHS

PRINCIPAL INVESTIGATOR: Nikaido Yutaka

AFFILIATION: Doctoral student (D3), Maezono Lab

ADDRESS: 1-1 Asahidai, Nomi, Ishikawa 923-1292 Japan

PHONE: +81-761-51-1240

EMAIL: mwk1805nkd@icloud.com

WEBPAGE: <http://www.jaist.ac.jp/is/labs/maezono-lab/homepage2019/index.html>

MACHINE USED: XC40

2. PROJECT DESCRIPTION:

Although boron nitride (BN) is a well-known compound widely used for engineering and scientific purposes, the phase stability of its polymorphs, one of its most fundamental properties, is still under debate. The *ab initio* determination of the ground state of the BN polymorphs, such as hexagonal and zinc-blende, is difficult because of the elusive van der Waals interaction, which plays a decisive role in some of the polymorphs, making quantitative prediction highly challenging. Hence, despite multiple theoretical studies, there has been no consensus on the ground state yet, primarily due to contradicting reports. In this study, we apply a state-of-the-art *ab initio* framework–fixed-node diffusion Monte Carlo (FNDMC), to four well-known BN polymorphs, namely hexagonal, rhombohedral, wurtzite, and zinc-blende BNs. Our FNDMC calculations show that hBN is thermodynamically the most stable among the four polymorphs at 0 K as well as at 300 K. This result agrees with the experimental data of Corrigan et al. [1] and Fukunaga [2]. The conclusions are consistent with those obtained using other high-level methods, such as coupled cluster. We demonstrate that the FNDMC is a powerful method to address polymorphs that exhibit bonds of various forms. It also provides valuable information, like reliable reference energies, when reliable experimental data are missing or difficult to access. Our findings should promote the application of FNDMC for other van der Waals materials.

[1] F. Corrigan et al., J. Chem. Phys. 63, 3812 (1975).

[2] O. Fukunaga, Diamond Relat. Mater. 9, 7 (2000).

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Maezono Ryo / School of information science.
- Associate Prof. Prof. Hongo Kenta / Research Center for Advanced Computing Infrastructure.
- Assistant Prof. Nakano Kousuke / School of information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [2].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [at least 1].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2021 USING JAIST FACILITIES

[1] “Diffusion Monte Carlo Study on Relative Stabilities of Boron Nitride Polymorphs”, Y. Nikaido, T. Ichiba, K. Hongo, F. A. Reboredo, K. C. H. Kumar, P. Mahadevan, R. Maezono, K. Nakano, J. Phys. Chem. C., 126, 6000–6007.

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2022 USING JAIST FACILITIES

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] ' Developing Pseudopotential capable of reducing locality error for use in DMC (temporary)' [Y. Nikaido], [journal (temporary)].

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

BENCHMARKING CALCULATIONS FOR BINDING ENERGY OF THE G2 SET MOLECULES USING QUANTUM MONTE CARLO

PRINCIPAL INVESTIGATOR: Abhishek Raghav

AFFILIATION: Doctoral student (D3), Maezono Lab

ADDRESS: 1-1 Asahidai, Nomi, Ishikawa 923-1292 Japan

PHONE: +81-761-51-1240

EMAIL: mwkabr1915@icloud.com

WEBPAGE:

MACHINE USED: Kagayaki

2. PROJECT DESCRIPTION:

In this work, we report accurate binding energy calculations for 55 molecules in the G2 set, using lattice regularized diffusion Monte Carlo (LRDMC) within TurboRVB quantum Monte Carlo package. We employ both the more traditional *ansatz* namely the Jastrow Slater Determinant (referred here as JDFT) as well as the more flexible *ansatz* namely the Jastrow anti-symmetrized geminal power with singlet correlation (JAGPs). The orbital/pair functions are expanded in terms of the triple-zeta basis set. Using a more general electron pairing function, we expect the JAGPs *ansatz* to be more efficient in determining the correlation energy. The many-body wave functions are first optimized at the variational Monte Carlo (VMC) level, which includes both the Jastrow factor and the nodal surface optimization. This is followed by the LRDMC projection of the *ansatz*. When using the JAGPs *ansatz*, the LRDMC binding energies were found to achieve the chemical accuracy (1 kcal/mol) for many molecules; they were also found to be accurate within 5 kcal/mole for most of the other cases. We obtained a mean absolute deviation of 1.6 kcal/mol with JAGPs and 3 kcal/mol with JDFT. This work shows the effectiveness of these more flexible *ansatz* in the TurboRVB code for binding energy calculations and electronic structure simulations in general.

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Dr. Kousuke Nakano/School of Information Science
- Rohit Dahule/School of Material Science
- Prof. Ryo Maezono/School of Information science
- Prof. Kenta Hongo/RCACI

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [03].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [02].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2021 USING JAIST FACILITIES

[1] K. Nakano, [A. Raghav](#) and S. Sorella. "Space-warp coordinate transformation for efficient ionic force calculations in quantum Monte Carlo", **J. Chem. Phys.** 156, 034101 (2022)

[2] R. Dahule, A. Raghav, A.T. Hanindriyo, K. Hongo, R. Maezono, and E. Panda. "Surface Study of Cu₂SnS₃ Using First-Principles Density Functional Theory", **Adv. Theory Simul.** 4, 2000315 (2021)

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2022 USING JAIST FACILITIES

BENCHMARK ALL-ELECTRON AB INITIO QUANTUM MONTE CARLO CALCULATIONS WITH AGP FOR G2-SET MOLECULES

In this work, very accurate binding energy calculations for small molecules (like CH₄, NH₃ etc.) will be performed using the Quantum Monte Carlo code, TurboRVB. This code allows very flexible starting wave functions like the Pfaffian (Pf) and the Antisymmetrized Geminal Power (AGP). As a result, it includes correlation effects which are beyond traditional ansatz like Slater Determinant, used in other QMC codes. It also supports optimization of Jastrow as well as the nodal surfaces at the VMC level. We hope that these would lead to more accurate calculation of the binding energy within the chemical accuracy (1 kcal/mol) for small molecules in the standard "G2 set". This work would show the effectiveness of these more flexible ansatz in TurboRVB code for binding energy and other calculations.

INVESTIGATING DOPANT INDUCED CHANGE IN THE BAND STRUCTURE AND HENCE THE EFFECTIVE MASS OF CHARGE CARRIERS FOR VARIOUS DOPED TiO₂ SYSTEMS.

TiO₂ is a very important material in the field of photocatalysts and optoelectronics. It can be readily doped with various dopants to make it suitable for specific purposes like as a photocatalyst or as a transparent conductor. In this project, we are investigating how dopants effect the band curvatures and hence the effective mass of the charge carriers in TiO₂, which ultimately effects the material properties. We are examining several dopants including Nb, Ta, V, W, Cu, Co, Ce, La. How the concentration of dopants affects effective masses and band structures is also investigated. This will help in predicting appropriate dopant systems for optoelectronic and photocatalytic applications.

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] 'Benchmark all-electron *ab initio* binding energy calculations for molecules in the G2-set: Towards chemical accuracy by the Jastrow correlated Antisymmetrized Geminal Power (JAGP)', [Abhishek Raghav, Ryo Maezono, Kenta Hongo, Sandro Sorella, Kousuke Nakano], [J. Chem. Phys. (temporary)] (manuscript under preparation).

[2] 'Electronic structure and effective mass investigation of doped TiO₂ systems (temporary)', [Abhishek Raghav, Emila Panda, Kenta Hongo, and Ryo Maezono], [Journal (temporary)]. (manuscript under preparation).

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

APPLICATION OF CANONICAL AUGMENTATION TO THE ATOMIC SUBSTITUTION PROBLEM

PRINCIPAL INVESTIGATOR: Genki Imam Prayogo

AFFILIATION: Doctoral Student (D3), Maezono Lab.

PHONE: +81-761-51-1240

EMAIL: g.prayogo@icloud.com

MACHINE USED: Kagayaki

2. PROJECT DESCRIPTION:

Supercell model is often utilized to study a disordered system within periodic ab-initio framework. In this model, a finite-size supercell is created to mimic the disordered system in which a certain number of target elements are substituted randomly. The key issue of generating supercells is how to identify and eliminate symmetry-equivalent structures from a vast number of substitution patterns. The symmetry-equivalent structures are physically identical, and thus redundant for ab-initio simulations. By reducing the number of considered structures to only those which are symmetrically unique, the computational cost can be reduced by various order of magnitude. In this work, we mapped the atomic substitution problem into a graph coloring problem, implementing the canonical augmentation as the isomorph rejection technique. In this approach, symmetry-equivalent structures are pruned in a search tree, covering the space of all possible substitutions, without directly comparing the structures. To further improve rejection efficiency, we also incorporated quantities derived from the structural information into the algorithm. Built upon these concepts, we developed a python package, called SHRY (Suite for High-throughput generation of models with atomic substitutions implemented by python), whose main function is to identify and select, from any given structures, a single representative structure for each symmetry-equivalent class of structures. We benchmarked its performance against existing approaches, confirming its significant efficiency over existing approaches.

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Dr. Kousuke Nakano / School of Information Science
- Prof. Kenta Hongo / School of Information Science
- Prof. Ryo Maezono / School of Information Science

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [6].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [2].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2021 USING JAIST FACILITIES

- [1] G. I. Prayogo, A. Tirelli, K. Utimula, K. Hongo, R. Maezono, K. Nakano, "Application of canonical augmentation to the atomic substitution problem", (under review to **J. Chem. Inf. Model.**)
- [2] G. I. Prayogo, H. Shin, A. Benali, R. Maezono, K. Hongo, "Importance of van der Waals interaction in hydrogen adsorption on silicon-carbide nanotube revisited with vdW-DFT and QMC", **ACS Omega** 6, 24630 (2021)

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2022 USING JAIST FACILITIES

GROUND STATE ENERGETICS OF VANADIUM CHALCOGENIDES LiVX_2 ($\text{X}=\text{O},\text{S},\text{Se}$) BY DIFFUSION MONTE CARLO METHOD

Frustrated spin system has long been an interesting topic in physics due to the possibility of forming many different kinds of ground states. The vanadium chalcogenide is a classic case, with the geometrical frustration coming from the triangular lattice of its vanadium layer. It has been shown to exhibit exotic electronic states such as the valence-bond solid (VBS) state at low temperatures, experimentally evidenced by a metal-to-insulator transition together with the trimerization of the transition metal lattice. The metal-to-insulator transition occurred with the ($\text{X}=\text{O},\text{S}$) compounds, whereas with ($\text{X}=\text{Se}$) this transition did not occur, it keeps being metallic to well down to 2 K. The strongly correlation inherent in the system makes it difficult to model by one-body theory such as the popular density functional theory (DFT). Energetics from conventional DFT preferred trimerization of all three compounds, in contrary with experimental observations. In this work, we employed Diffusion Monte Carlo (DMC), which unlike DFT is found upon true many-body wave function and thus is able to effectively capture the electronic correlation. We assessed the relative stability between the trimerized and non-trimerized structures of LiVX_2 . The true nature of the insulating ground state was also clarified by through energetics and charge densities on DMC wavefunctions of spin-polarized and non-spin-polarized level.

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1] "Ground state determination of LiVX_2 system using diffusion Monte Carlo (temporary)",
[K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono], [journal (temporary)].

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

INFORMATION-SCIENTIFIC STRUCTURE SEARCH FOR TERNARY HYDRIDE HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS

PRINCIPAL INVESTIGATOR: SONG PENG

AFFILIATION: Doctoral student (D2), Maezono Lab

ADDRESS: 1-1 Asahidai, Nomi, Ishikawa 923-1292 Japan

PHONE: +81-761-51-1240

EMAIL: mwk2002spg@icloud.com

WEBPAGE:

MACHINE USED: Kagayaki

2. PROJECT DESCRIPTION:

Recently, with the discovery of a new room temperature superconducting hydride in the carbonaceous sulfur hydride, ternary hydrides have shown great prospects in the research of high-temperature superconductivity. The traditional method of studying ternary hydrides has undergone three steps of structure predict search, T_c calculation, and experimental verification. Nevertheless, this method will counter the bottleneck of being unable to find a reasonable chemical composition in the first step. Many studies have shown that once the chemical composition of the hydride is determined, there is a potential relationship between the maximum value of T_c and its chemical properties. Here we introduce a simple machine learning model to studying this properties and guiding search potential ternary high temperature superconducting chemical composition. By this approach, the La-Y-H, Y-Mg-H and Mg-Sc-H system are selected as candidates to investigate their structural stabilities and superconductivity by employing evolutionary-algorithm-based crystal search combined with first-principles calculations. Our calculations show that stable phases are concentrated on certain combination of binary hydride, mainly in form of clathrate structures enclosed by H_{14} , H_{18} H_{24} cages. The clathrate structures exhibit both a larger H-driven electronic density of states at the Fermi level and a denser H-driven phonon density of states, correlating with larger EPC constants. Among them, the sodalite-like structure $Fd-3m$ -YMgH₁₂ was predicted to have the highest T_c (i.e. 190 K) at 200 GPa.

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

-Kousuke Nakano/School of Information Science.

-Prof. Kenta Hongo/Research Center for Advanced Computing Infrastructure.

-Prof. Ryo Maezono/School of Information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [0].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [2].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2021 USING JAIST FACILITIES

[1] P. Song, Z. Hou, P. B. de Castro, K. Nakano, K. Hongo, Y. Takano and R. Maezono. "High- T_c superconducting hydrides formed by LaH₂₄ and YH₂₄ cage structures as basic blocks". *Chem. Mater.* **33** 9501 (2021)

[2] P. Song, Z. Hou, P. B. de Castro, K. Nakano, Y. Takano, R. Maezono and K. Hongo. “The systematic study on the stability and superconductivity of Y-Mg-H compounds under high pressure”. *Adv. Theory Simul.* **2100364** 1-10 (2022)

[3] P. Song, Z. Hou, P. B. de Castro, K. Nakano, K. Hongo, Y. Takano and R. Maezono. “High-pressure Mg-Sc-H phase diagram and its superconductivity from first-principles calculations”. *J. Phys. Chem. C.* **125** 2747-2755 (2022)

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2022 USING JAIST FACILITIES

[1] Potential high- T_c superconductivity in YCeH₂₀ and LaCeH₂₀ under pressure

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] ' High- T_c ternary metal hydrides, YKH₁₂ and LaKH₁₂, discovered by machine learning', [Kousuke Nakano, Kenta Hongo and Ryo Maezono], [journal (temporary)].

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

INTERFACE ENGINEERING OF PN HETEROJUNCTION FOR SNS BASED THIN-FILM SOLAR CELL

PRINCIPAL INVESTIGATOR: Rohit Dahule

AFFILIATION: School of Materials Science, JAIST, Japan

ADDRESS: 1-1 Asahidai, Nomi, Ishikawa 923-1292 Japan

PHONE: +81-761-51-1240

EMAIL: mwkrttd2103@icloud.com

WEBPAGE: If available

MACHINE USED: Kagayaki

2. PROJECT DESCRIPTION:

Thin-film solar cells (TFSC) are a potential energy source because of their low-cost material. The buffer layer materials (n-type) play a critical role in obtaining high power conversion efficiency by forming a junction with the absorber layer materials (p-type) and generating an inbuilt electric field essential for photo-charge carrier separation. In this study, α -CdS, β -CdS, α -ZnS, β -ZnS, and Zn(O,S) were investigated using density functional theory (DFT) to determine the optimum buffer layer for TFSC. The DFT simulations were performed using the Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) and were used to compute the electronic structure of buffer layers. The Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) functional assuming the generalized gradient approximation was adopted as our exchange-correlation functional. The geometry optimizations were done with thresholds for the energy (1×10^{-5} eV/cell) and force (0.01 eV/Å) convergences. A plane-wave basis set (450 eV kinetic energy cutoff) was employed with well converged k-point sampling. A plane-wave basis set (450 eV kinetic energy cutoff) was employed with well converged k-point sampling. The bandgap of bulk α -CdS, β -CdS, α -ZnS, β -ZnS and Zn(O,S) were found to be 1.0272 eV, 1.1087 eV, 2.0033 eV, 2.0754 eV, 0.5523 eV, respectively. Among the above materials β -ZnS have a wider bandgap than other buffer layers and consist of non-toxic elements (Zn and S). Therefore, the β -ZnS is a more suitable buffer layer material and can be used as an n-type for heterojunction TFSC. Moreover, the valence band of β -ZnS was found to be composed of S 3p states along with a minor contribution from Zn 3d and Zn 3p states. Whereas the conduction band (CB) is found to primarily consist of unoccupied Zn 4s states along with a small contribution from the unoccupied S 3s States.

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Ryo Maezono /School of Information science.
- Prof. Kenta Hongo/ School of Information science.

A/How many co-authored publications with JAIST faculties so far [02].

B/How many co-authored publications with JAIST faculties planned in the future [02].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2021 USING JAIST FACILITIES

- [1] 'Surface Study of Cu_2SnS_3 Using First - Principles Density Functional Theory' Rohit Dahule; Abhishek Raghav, Adie Tri Hanindriyo, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Emila Panda, Adv. Theory Simul. (2021)
- [2] "Anomalies in the bulk and surface electronic properties of SnS: effects of native defects." Dahule, Rohit, Chetan C. Singh, Kenta Hongo, Ryo Maezono, and Emila Panda. J Mate. Chem. C (2022).

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2022 USING JAIST FACILITIES

In FY 2022, I am planning to do the first-principles calculation to evaluate the surface electronic structure of n-type semiconductor material and create the heterojunction of this materials with the SnS (p-type semiconductor). Furthermore, the interface study of PN heterojunction of SnS and n-type material for the application of thin-film solar cells.

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1] Interface engineering of PN heterojunction for SnS-based thin-film solar cell, [Ryo Maezono and Kenta Hongo], [ACS Applied Materials & Interfaces].
- [2] Intrinsic electronic defect at the interface of PN heterojunction for SnS-based thin-film solar cell. [Ryo Maezono and Kenta Hongo] [ACS Applied Materials & Interfaces].

2022年5月30日

情報社会基盤研究センター 井口

共同研究先企業: 富士通 J a p a n 株式会社

ヘルスケアソリューション開発本部 部門ソリューション事業部

米田 一徳、岩村 尚、他

共有計算サーバー使用成果報告書

1. 研究目的

本研究は超大規模連立一次方程式の高速解法の開発と題して、超大規模シミュレータのホットスポットの一つである心臓の力学現象などの計算部分を大規模並列アーキテクチャ上で高速化するための手法の開発を行っている。

2. 使用計算機: 主として Kagayaki

3. 成果

(ア) FFR シミュレーションの研究開発

CT 画像から抽出した冠動脈形状とその他の臨床情報を元に、非侵襲で FFR 値を推定するシミュレータ (いわゆる FFRCT) の研究開発を進めた。kagayaki においては、従来のシミュレーション手法と血液の灌流領域を考慮した新しいシミュレーション手法の比較検討を実施したところ、さらなる改良が必要な点が明らかになってきた。

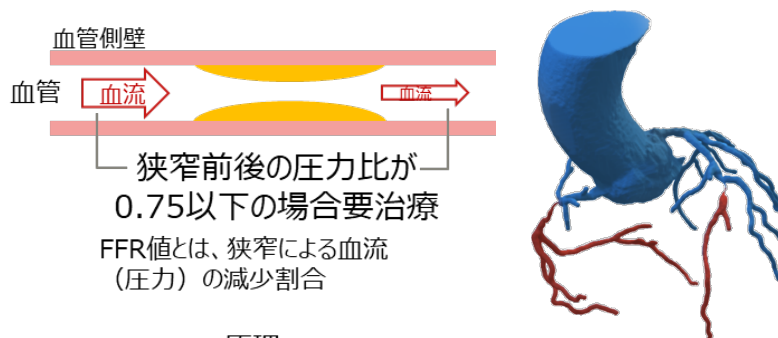


図 1: 原理 FFR の原理とシミュレーション結果

(イ) COVID-19 の AI 開発

胸部 CT 画像の肺領域のうち COVID-19 肺炎に特徴的に見られるパターンがある可能性を算出し、COVID-19 肺炎である確率を Low, Mid, High の 3 段階で表示する AI の研究開発した。kagayaki においては、モジュールの一部の評価・検討を行った。

3d遷移金属元素で構成される等モル量4元系合金の規則-不規則競合協調関係

韓国科学技術研究院 水関博志

情報社会基盤研究センター 本郷研太

使用計算機: Dell EMC PE R6525 SCS

概要

ほぼ等モル量の 4-5 種類以上の元素から構成されるハイエントロピー合金(HEA)系は、特異な機械的性質を示すことから新しい構造材料として期待されている。「エントロピー」が高い状態、すなわち、各元素が結晶構造格子上にランダム配置している固溶体として扱うことで、従来のハイエントロピー合金研究は進められてきた。しかし、CrFeCoNi 合金が L1₂ 規則相の存在を示すなど、近年、この描像に疑問を投げかける研究報告もされている。本研究課題では、6 種類の構成元素 (Cr、Mn、Fe、Co、Ni、および Cu) のうちの 4 種類を含む等モル量 4 元系合金を HEA モデル系とした。第一原理サンプリングにより得られたエンタルピー項に、温度に依存する配置エントロピー項を加えて、固溶体、L1₂、D0₂₂ の規則相の安定性を評価した。価電子密度(VEC)と温度が有限温度での HEA 規則相の安定性を決定する重要な因子であることを明らかにした。(参考文献 1)

これらの共同研究をさらに発展、拡大させるために令和 3 年度 JSPS 二国間交流事業 (セミナー) に応募し、採択された。新型コロナウイルス感染症の拡大により、当初予定の令和 3 年 6 月のセミナー開催は難しく、令和 4 年度内の開催を目指したい。

参考文献

1. Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, and Kenta Hongo, "Order-Disorder Competitive Cooperation in Equiatomic 3d Transition-Metal Quaternary Alloys: Phase Stability and Electronic Structure", arXiv:2110.02587

学会発表

1. Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, and Kenta Hongo, "Investigation of Ordering Mechanism in 3d-transition-metal-based HEAs by First-principles High-throughput Sampling", The Korean Institute of Metals and Materials, Fall 2021, (Jeju, Korea (on-line), October 20-22, 2021.)

2. Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, and Kenta Hongo, "Application to High Entropy Alloys using VASP", PCoMS & RISME TOMBO Seminar: First-Principles Theory, Computation, and Hands-On 2022, (Tohoku University, Sendai, Japan (on-line), March 23, 2022.)

3. Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, and Kenta Hongo (Invited), "3d-transition-metal-based HEAs by High-throughput Sampling based on First-principles Calculations", ACCMS - International Conference on Materials Genome, ACCMS-ICMG 2022, (SRM University, AP - Amaravati, India (on-line), March 24-25, 2022.)

獲得資金

令和3年度JSPS二国間交流事業 (セミナー) 研究代表者: 本郷研太「統合型マテリアルズ・インフォマティクスを用いた材料設計」(令和5年3月まで延長)

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

AB INITIO INVESTIGATION ON THERMODYNAMICS AND MICROKINETICS OF CHEMICAL PROCESS ON SURFACES/INTERFACES FOR GREEN-ENERGY APPLICATIONS

PRINCIPAL INVESTIGATOR: Mohammad Kemal Agusta

AFFILIATION: Bandung Institute of Technology

ADDRESS: Jl. Ganesha 10 Bandung 40132 Indonesia

PHONE: +62-22-2504424

EMAIL: agustakemal@gmail.com

WEBPAGE: -

MACHINE USED: (XC40/Altix/hster/Linux cluster)

2. PROJECT DESCRIPTION:

Ab initio DFT-based calculations are used to model and investigate phenomena related to the surface/interface of metals, alloys, and oxide. The aim is to obtain specific descriptors that determine the reactivity in thermal- and electrochemical conditions. The particular system of interest in this project are:

- Hydrazine reaction on transition metal alloys
- Lithium diffusion on oxides materials
- CO₂ conversion on transition metals clusters

The methodology includes calculating the reaction and activation energy of the reaction pathways that consist of numerous elementary steps. Connections to macroscopic experiments are made via thermodynamics and kinetics analysis on DFT results. Electronic structure analysis identifies the correlation between obtained thermodynamics and kinetics to intrinsic properties of the surface (or materials). The descriptor is also tested on its ability to explain the effects of strain and the presence of defects such as adatom, vacancy, and surface step edges.

Although the individual calculation of each system only requires moderate computational power, the number of reaction steps and possible configurations is large such that considerable computational resources are required. The other challenge is that some reactions should be modeled in a liquid environment. Although a phenomenological approach to treating such a case is available, it is interesting to study the effect of the solution explicitly by using ab initio molecular dynamics simulation.

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Ryo Maezono /School of Information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [5].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [5].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

- [1] Thermodynamics of Formic Acid Decomposition on Low-index Pd Surfaces: A First-Principles Investigation M. K. Agusta, , A. G. Saputro, M. H. Mahyuddin, H. H. Halim, P. H. K. Utama, H.K.Dipojono, R. Maezono, (in preparation)
- [2] “Selectivity of hydrazine N – N and N – H bond cleaving on Ni(111)”, M. K. Agusta, M. Irfandi, G. Sinaga, H. K. Dipojono, A. Nuruddin, R. Maezono (in preparation)

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES

AB INITIO INVESTIGATION ON CATALYTIC AND TRANSPORT PROPERTIES AT SURFACES AND INTERFACES FOR CATALYST AND BATTERY APPLICATIONS

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1] Thermodynamics of hydrazine decomposition pathways on NiZn and NiCo surfaces [the Journal of Physical Chemistry C]
- [2] Ab initio and microkinetics investigation of formic acid decomposition on Pd(100) [the New Journal of Chemistry/Applied Surface Science]
- [3] Polaron-assisted Li diffusion in reduced cerium oxide [Journal of Physics: Condensed Matter]

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

YOUR PROJECT TITLE

PRINCIPAL INVESTIGATOR: Mohaddeseh Abbasnejad

AFFILIATION: Shahid Bahonar university of Kerman, Kerman, Iran

ADDRESS: Dep. of Physics, Shahid Bahonar university, Pajooheh Sq., Kerman 76169-14111 Iran

PHONE: +989177317514

EMAIL: m.abbasnejad@gmail.com

WEBPAGE: https://physics.uk.ac.ir/en/~m_abbasnejad

MACHINE USED: (XC40/Altix/hster/Linux cluster) hster, XC40

2. PROJECT DESCRIPTION:

In recent years, two-dimensional zinc oxide (ZnO) material has become known as a promising material in the thermoelectric applications due to its low cost and non-toxicity. We would like to study the thermoelectric response of ZnO monolayer, made of polar surface (0001), in pure and defect vacancy containing both oxygen and zinc in the framework of density functional theory and Boltzmann transport theory. Thermoelectric parameters such as electrical conductivity, Seebeck coefficient, electron thermal conductivity and power factor of pure and oxygen/zinc defect ZnO monolayer would be investigated in terms of chemical potential. Due to the direct correlation of dimensionless quantity of figure of merit (ZT) with the power factor and inverse of thermal conductivity, it is expected that these compounds have relatively high values of ZT. Such a prediction increases the possibility of using ZnO monolayers in thermoelectric based applications to convert waste heat into electrical energy.

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Ryo Maezono/School of information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [4].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [at least 2].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

- [1] "Bandgap reduction of photocatalytic TiO₂ nanotube by Cu doping", S. K. Gharaei, M. Abbasnejad, R. Maezono, Scientific reports 2018, 8 (1), 14192.
- [2] "Magnetic ordering of Ti-doped single ZnO monolayer", O. Jowhari Shirazi, M. Abbasnejad, R. Fathi, R. Maezono, submitted to Physica E Low Dimens. Syst. Nanostruct.
- [3] "Electronic and magnetic properties of pure and Cu doped ZnO non-polar surface", E. Irandegani, R. Maezono, M. Abbasnejad, under preparation.
- [4] "Structural and electronic properties of Cu doped ZnO nanowire", E. Irandegani, F. Badpa, R. Maezono, M. Abbasnejad, under preparation.
- [5] "Piezoelectric properties of ZnO monolayer via first principle calculations", [Ryo Maezono], [Journal of Applied Physics].

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES

Study of electronic transport coefficients of ZnO monolayer using ab initio calculations.

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] “electronic transport coefficients of ZnO monolayer via first principle calculations”, [Ryo Maezono], [Journal of Applied Physics].

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

Understanding the phase stability of oxides in the context of fine tuning their functional properties including role of plasmonic properties of nitrides - a combinatorial approach based on computations and experiments.

PRINCIPAL INVESTIGATOR: Niraja Moharana

AFFILIATION: Doctoral student, IIT Madras, India

ADDRESS: Department of Metallurgical and Materials Engineering, IIT Madras, Chennai – 600036, India

PHONE: +91-8763318358

EMAIL: niraja.moharana@gmail.com

WEBPAGE: NA

MACHINE USED: Kagayaki

2. PROJECT DESCRIPTION:

Plasmonic nanocrystals of transition metal nitrides (for eg: TiN) crystallized insitu in a Si-O-C-N ceramic matrix have been synthesized via precursor approach which are referred to as polymer derived ceramics (PDCs). It is possible to control the size and volume fraction of the nanocrystals by appropriate heat-treatment. The idea is to explore and establish the precise role of crystallite size on the plasmonic response of such nitrides-nanocomposites both experimentally and computationally. Experimentally, UV-visible spectroscopy was used to confirm the plasmonic behavior of these nanocomposites so that one could establish the crystallite size dependence of plasmonic behavior as well as the plasmonic peak shifts which could be a consequence of strain effects imposed by the matrix on the nitride crystallites.

To establish the plasmonic peak computationally, dielectric (imaginary part) needs to be plotted as a function of energy (optical absorption spectra). It will be useful to replicate the experimental absorption spectra i.e., plasmonic peak measured by UV-visible spectroscopy. Time dependent density functional theory (TDDFT) can be used for this purpose. It calculates the evolution of electrons under the effect of oscillating electric field associated with the presence of photon. It is based on Runge-Gross theorem which states that “for a given initial state, the time evolving one body density tells you everything about the time evolving interacting electronic system exactly”.

VASP uses Bathe Salpeter equation (BSE) to solve the TDDFT. It determines optical response function (frequency dependent dielectric function) including excitonic effect. A preceding GW step is needed to determine the screened coulomb kernel. GW method, which is a post DFT step, takes into account the coulombic interaction of the system (W). It provides the access to the spectral properties of the system by determining the energies of the quasiparticles of the system using a screened exchange like contribution to the self-energy. A significant number of empty bands are needed for this approach. Hence, the approach is very time consuming and need more memory even for a simple compound (ex-TiN).

Another approach, Quantum espresso uses time dependent density functional perturbation theory (TDDFPT) to calculate the optical spectra. Liouville-Lanczos method is used to calculate the full optical spectrum for the wide energy range. This method avoids using large number of empty bands. Instead, it uses a projector operator on to the occupied states. Hence, it uses less time and memory.

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Ryo Maezono/School of Material science

A/How many co-authored publications with JAIST faculties so far [00].

B/How many co-authored publications with JAIST faculties planed in future [02].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

NA

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES

Same project as above.

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] 'Thermodynamic assessment of Hf-Ta-N system (temporary)', [Niraja Moharana, Ryo Maezono, N.V.Ravi Kumar, K.C.Hari Kumar], [Temporary].

[2] 'Plasmonic property of transition metal nitrides in a Si-O-C-N matrix: experiments and computational validation (temporary)', [Niraja Moharana, Ryo Maezono, N.V.Ravi Kumar, K.C.Hari Kumar], [Temporary].

ACTIVITY REPORT OF FY2021

1. PROJECT TITLE:

FIRST-PRINCIPLES MOLECULAR DYNAMICS STUDY ON STRUCTURE, PROPERTIES AND PLASTICITY MECHANISM OF $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ BINARY GLASS

PRINCIPAL INVESTIGATOR: YANG Yuting

AFFILIATION: ZHEJIANG University

ADDRESS: 38 Zheda Road, Xihu District, Hangzhou City, Zhejiang Province, China

PHONE: (+86)18867153832

EMAIL: 21926095@zju.edu.cn

WEBPAGE:

MACHINE USED: KAGAYAKI

2. PROJECT DESCRIPTION:

Using ab initio molecular dynamics to calculate the structure and properties of $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ binary glass with different aluminum contents, and the tensile simulation of the ground state structure is carried out to study the atomic movement under stress in the glass structure.

3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Ryo Maezono/School of materials science.
- Dr. Genki/School of materials science.
- Dr. Abhishek /School of materials science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [0].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [1].

4. PUBLICATION LIST DURING FY2021 USING JAIST FACILITIES

5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2022 USING JAIST FACILITIES

5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] ' First-principles molecular dynamics study on structure, properties and plasticity mechanism of $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ binary glass ', [YANG Yuting], [Journal of American Ceramic Society].

3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバ利用研究

分子シミュレーションを活用した糖鎖の立体構造の揺らぎの解析

マテリアルサイエンス系・山口拓実

使用計算機: PC Cluster, KAGAYAKI

概要

糖鎖は内部運動の自由度が高く、溶液中では一定の 3 次元構造を取らずに多数のコンフォマーの間を揺らいでいる。私たちは、計算科学アプローチと物理化学実験計測を組み合わせ、糖鎖の構造-機能相関の解明に取り組んでいる。分子動力学 (MD) シミュレーションは糖鎖の構造解析に有用だが、糖鎖の立体構造の差異を揺らぎ方の違いも含めて識別するには注意を要する。タンパク質研究の場合は、立体構造を解析・比較する方法として、複数の構造をアライメントした上で原子座標のずれを調べる方法が主に用いられる。しかし、立体構造の揺らぎが大きく、平均構造や特定の安定構造を扱えない糖鎖を扱うには、この方法は適切とは言えない。本研究では、小胞体レクチンの相互作用標的となる 3 本鎖高マンノース糖鎖をモデル分子とし、カーネル法を用いて構造アンサンブルを解析することに取り組んだ。

レプリカ交換 MD シミュレーションを通して、それぞれ 10,000 個のコンフォマーからなる高マンノース糖鎖の構造アンサンブルを得た。このデータから、アンサンブル中の個々のコンフォマーに対応するグリコシド結合の二面角や糖環構造の配座情報を変数とし、PC Cluster 上で R を使用してカーネル法に基づく解析を実施した。さらにクラスター分析を行った結果、構造アンサンブル中の種々のコンフォマーの分類に成功し、揺らぎの情報を抽出できる可能性を見出した。また本手法を用いることで、異なる糖鎖に特徴的なクラスターをあぶり出すことができ、糖鎖の揺らぎ方の違いを解析することができた。

また一方、神経細胞に見られるガングリオシド糖鎖を対象とした、レプリカ交換 MD シミュレーションを通じた構造解析も行った。シミュレーションには KAGAYAKI を利用し、AMBER20 プログラムパッケージを使用して行った。ガングリオシド系列の基本骨格となる直鎖状 3 糖である GM3 糖鎖では、末端シアル酸残基の分子内水素結合が顕著に見られた。これに対し、分岐構造が伸長される場合、この水素結合の形成は阻害され、シアル酸残基の配座空間とダイナミクスが大きく摂動を受けることがわかった。今後、非線形相関解析を応用することで、特徴的な揺らぎとその制御因子を調査し、生命機能の発現に関連する動的性質を明らかにしたいと考えている。

関連発表論文

- 1) T. Watanabe, H. Yagi, S. Yanaka, T. Yamaguchi, K. Kato, “Comprehensive characterization of oligosaccharide conformational ensembles with conformer classification by free-energy landscape via reproductive kernel Hilbert space,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2021, 23, 9753–9760. 査読有
- 2) K. Kato, T. Yamaguchi, M. Yagi-Utsumi “Experimental and computational characterization of dynamic biomolecular interaction systems involving glycolipid glycans,” *Glycoconj. J.* 2022, 39, 219–228. 査読有
- 3) T. Yamaguchi, T. Watanabe, H. Yagi, S. Yanaka, K. Kato, “Comprehensive characterization of oligosaccharide dynamical conformations by a kernel method in conjunction with graph theoretical techniques,” *Pacificchem* 2021, オンライン, 2021 年 12 月.

自己無撞着フォノン計算による Ag-P 化合物中の Ag 原子の非調和振動の研究

先端科学技術研究科

宮田全展

使用計算機: KAGAYAKI

概要

石油や天然ガスなどの資源を用いた一次産業エネルギーのうち、エネルギーとして回収できるのは 33%程度であり、残りの 67%は未利用熱として廃棄されている。特に、蒸気タービンを利用したエネルギー回収が困難な 150°C以下の低温排熱は大きな割合を占めるため、低温排熱からエネルギーを回収する技術が求められている。中でも、熱電変換は電子を作業流体として、熱エネルギーを電気エネルギーに直接相互に変換できる唯一の技術として注目を集めている。現在、応用に用いられている熱電変換材料は、 Bi_2Te_3 や PbTe といった Te 化合物である。Te は Pt と同程度の地殻埋蔵量しかない為、Te 化合物に代わる代替材料として硫化物、シリサイド、ハーフホイスラー合金材料などの研究が世界各国で精力的に行われている。

本研究では、他の材料系と比較して未開拓領域であるリン化合物に注目し、新規高性能熱電材料の探索を行っている。中でも、本研究で低い格子熱伝導率を示すことが明らかとなった Ag_3SnP_7 について、実験による合成・物性評価と併せ、本学の計算機 KAGAYAKI を用いて、4 次の非調和項を考慮した自己無撞着フォノン計算による詳細なフォノン輸送計算を実施した。構造緩和計算・力の計算には第一原理計算コード OpenMX、2-4 次の原子間力定数の計算には、フォノン輸送計算コード ALAMODE を用いた。計算と実験結果の比較から、 Ag_3SnP_7 中の 4f サイトの Ag 原子が大きな非調和振動モードを示し、フォノンを強く散乱することで低い格子熱伝導率を示すことを明らかにした。^{1,2,3)}

リン化合物以外では、地元企業の株式会社白山をプロジェクトリーダーとした、シリサイド系熱電材料のモジュール開発の研究に共同研究者の一員として昨年度に引き続き参画し、電子・フォノン輸送計算の観点からモジュール素子の材料設計指針を提案した⁴⁾。

関連発表論文 (査読あり)

1) **M. Miyata**, Journal of Applied Physics, **130**, 035104(2021). **[Editor's Pick]**

関連書籍

2) 計算科学を活用した熱電変換材料の研究開発動向, 第 2 章 第一原理電子・フォノン計算と実験を活用したリン化合物熱電材料の創製, (株)シーエムシー・リサーチ, 2022.

関連取得研究費

3) 科学研究費補助金 若手研究 (基金), Ag-P クラスター構造を有するリン化合物熱電材料のフォノン輸送メカニズムの解明, 令和 2 年度~4 年度, 研究代表者: **宮田 全展**

4) 中小企業経営支援等対策費補助金 (戦略的基盤技術高度化支援事業), 高性能プロセッサの発熱問題を解決する環境調和型電子冷却モジュールの開発, 実施期間: 2019 年 7 月 29 日~2022 年 3 月 31 日, 研究分担者名: 小矢野 幹夫
研究員: **宮田 全展**, 小矢野 幹夫

機械学習による Ziegler-Natta 触媒一次粒子の非経験的構造決定と構造性能相関解明

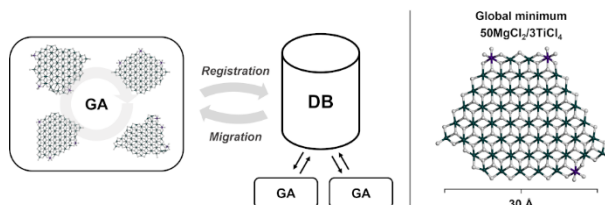
所属・氏名 高棹玄徳, 谷池俊明

使用計算機: VPCC, LMPCC

工業的なポリオレフィン製造の主流を占める Ziegler-Natta 触媒の重要な性質の一つに、マルチサイト性、つまり得られるポリマーの構造分布がある。しかし、その起源については未だ十分に明らかにされていない。このような基礎理解は触媒の体系的な設計に貢献すると期待されている。本研究課題における 2021 年度の利用成果を以下に示す。

1. 非同期的分散遺伝的アルゴリズムの実装と数 nm サイズでの構造決定の実現

構造データベースからの移住オペレータによる非同期的分散遺伝的アルゴリズムの実装によって構造決定プログラムの探索効率を向上させた。これにより、現実の触媒に近いサイズの系である 30MgCl_2 、 50MgCl_2 および $50\text{MgCl}_2/3\text{TiCl}_4$ に対する構造決定を実現した。ここで、構造データベースは各 GA で計算されたすべての構造と計算結果を保持し、各 GA では一定の世代ごとにデータベースから構造を集団に追加する(移住オペレータ)。この実装は GA の集団内における遺伝的多様性を保つことで早期収束問題を解決し、大局解への収束を著しく改善した。



2. $\text{MgCl}_2/\text{TiCl}_4$ 系のプロピレン重合シミュレーション

構造決定によって得られた $\text{MgCl}_2/\text{TiCl}_4$ ナノプレートをもとにプロピレン重合のシミュレーションを行った。活性点構造の分布はプロピレン重合における触媒性能の分布をもたらし、立体制御配位子を 2 つ持つ Ti 種は立体選択性を示し、欠陥表面と高被覆率がこのような配位子を生み出す。本触媒で長らく疑問視されていた、ドナーフリー触媒における立体特異性の起源を明らかとした。

3. $\text{MgCl}_2/\text{TiCl}_4/\text{donor}$ 系の構造決定

有機分子を含む複数の吸着子に対して非経験的構造決定プログラムを拡張し、ドナー分子の吸着を伴った構造決定を実現した。ドナー分子を遺伝的アルゴリズム上で取り扱うに際し、多様な欠陥表面を仮定した事前計算によって非現実的な吸着形態の除外を行った。ドナー分子には工業的に用いられる 9,9-ビス(メトキシメチル)フルオレンを使用し、実触媒の被覆率を参照した $19\text{MgCl}_2/4\text{TiCl}_4/5\text{Donor}$ 系に対する構造決定を実施した。得られた安定構造群の表面は吸着によって大きく再構成され、完全被覆状態であった。有限な表面において吸着子を高密度に担持する事のエネルギー的な優位性から、 $\{100\}$ 表面の再構成によって生じる $\{110\}$ テラスおよび $\{110\}$ テラス上の $\text{TiCl}_4/\text{ドナー}$ 共吸着構造が支配的である事が明らかとなった。

本研究課題の中核を為す非経験的構造決定における反復的な DFT 計算は多大な計算量を要求するものであり、遂行にあたっては本学の計算機環境が必要不可欠であった。

関連発表論文

1. "Preventing Premature Convergence in Evolutionary Structure Determination of Complex Molecular Systems: Demonstration in a Few-nm Sized TiCl_4 -Capped MgCl_2 Nanoplate", **Takasao, G.**, Wada, T., Chikuma, H., Chammingkwan, P., Terano, M., and Taniike, T., J. Phys. Chem. C, submitted.
2. "Formation of highly active Ziegler-Natta catalysts Clarified by a Multifaceted Characterization Approach", Piovano, A., Wada, T.; Amodio, A., **Takasao, G.**, Terano, M., Chammingkwan, P., Groppo, E., Taniike, T., ACS Catal. 2021, 11 (22), 13782–13796
3. "Spectroscopic fingerprints of $\text{MgCl}_2/\text{TiCl}_4$ nanoclusters determined by machine learning and DFT", D'Amore, M., **Takasao, G.**, Chikuma, H., Wada, T., Taniike, T.; Fabien, P., Ferrari, AM., J. Phys. Chem. C. 2021, 125 (36), 20048–20058.
4. "Electronic Properties of Ti Sites in Ziegler-Natta Catalysts", Piovano, A.; Signorile, M.; Braglia, L.; Torelli, P.; Martini, A.; Wada, T.; **Takasao, G.**; Taniike, T.; Groppo, E., ACS Catal., 11 (15), 9949–9961.

関連取得研究費

- 1) JSPS 科研費 20J15042 (令和 2 年度 特別研究員 DC2 特別研究員奨励費)

ナノ触媒の非経験的構造決定を目的とした機械学習ポテンシャルの構築

所属・氏名 先端科学技術研究科 谷池研究室・筑間弘樹

使用計算機: pcc, Impcc, KAGAYAKI

Ziegler-Natta 触媒 (ZN 触媒) は、現代のポリオレフィン生産の中核を担う触媒である。その構造単位である一次粒子は、 MgCl_2 ナノプレートが TiCl_4 によって終端されていると考えられており、その構造は触媒機構解明の基礎となる。しかし、固体触媒に代表される複雑な材料において分子レベルの情報は実験的に得難く、ZN 触媒においても構造の詳細は未解明である。これを解決するため、先行研究では密度汎関数法 (DFT) と遺伝的アルゴリズム (GA) を組み合わせた実験結果によらない非経験的な構造決定が試みられてきた[1]が、構造の探索空間および DFT の計算コストは対象系の規模に対して指数関数的に拡大するため、実在サイズでの構造決定は困難であった。本研究では計算コストの問題を解決すべく、先行研究[1]によって蓄積された $\text{MgCl}_2/4\text{TiCl}_4$ 触媒系に対する DFT データベースを用いて、DFT 計算結果を高精度に再現できるニューラルネットワークポテンシャル (NNP) を構築し、計算の高速化を図った。また、構築された NNP を用いて構造決定を行い、DFT による構造決定結果との比較を行った。

本年度の検証では、ニューラルネットワーク (NN) の訓練および、非経験的構造決定を行った。NNP 構築のためにはその巨大なデータセットを用いた訓練が必要であること、構造決定を行うためには膨大な配向空間の探索が必要であることから十分な計算リソースが必要であり、共有計算サーバーを活用した。

NN アーキテクチャには Behler-Parinello 型 NN[2]を採用し、 19MgCl_2 系および $19\text{MgCl}_2/4\text{TiCl}_4$ 系それぞれにおいて、NNP を構築した。また、NNP による原子間力予測を用いた構造最適化と GA による広域探索を組み合わせることで構造決定を行った。NNP 構築には RuNNer を用い、構造最適化計算には LAMMPS を用いた。

$19\text{MgCl}_2/4\text{TiCl}_4$ 系についての結果を述べる。構築した NNP のエネルギーおよび原子間力予測値の RMSE はそれぞれ $1.10 \text{ kcal mol}^{-1}$ 、 $1.48 \text{ kcal mol}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$ であり、化学的精度 1 kcal mol^{-1} に匹敵する精度を持つ NNP が得られた。NNP と GA による構造決定の結果を Figure 1 に示す。グラフには各世代における最安定構造のエネルギーがプロットされている。世代数の増加に伴い世代内の最安定構造のエネルギーが減少していくことから、構造の進化が確かに行われていることを確認した。本研究では、ZN 触媒のような複雑な触媒系について、高速かつ高精度な構造決定を実現する NNP 構築に成功した。

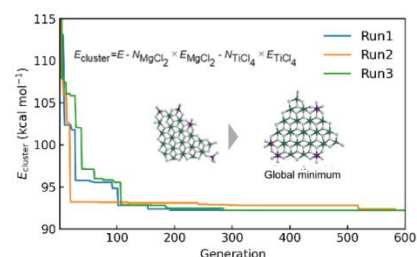


Figure 1. Evolutionary progress plot for the structure determination. The energy of the most stable structure in a generation is plotted against the generation.

【関連発表】

- 1) "触媒ナノ粒子の構造決定を目的としたニューラルネットワークポテンシャルの構築", 筑間 弘樹, 高棹 玄德, Behler Jörg, 谷池 俊明, 2021 年度 日本化学会近畿支部 北陸地区講演会と研究発表会, オンライン開催, 2021 年 11 月 12 日, ポスター.

【参考文献】

[1] G. Takasao, et al. J. Catal. 2021, 394, 299–306.

[2] J. Behler, et al. Phys. Rev. Lett. 2007, 98, 146401.

※本学の計算サーバから得られた成果は、申請者の修士論文に利用された。

Calculation on interaction enthalpy of hydrogen bond between polybenzazole molecular chains

Material science, ZHONG Xianzhu (Kaneko lab)

PC cluster system (GPU, vpcc)

Abstract

Polybenzozoles are well known for its outstanding thermal stability. Terpolymer PBI-*co*-PBO-*co*-PA was synthesized with an ultrahigh thermal resistance, the 10% weight loss temperature reaches 760 degrees, this decomposition temperature is the highest in that of organic materials, even comparable with some inorganic and metal materials.

To reveal the ultrahigh thermal stability of the polybenzazoles, the interaction enthalpy of hydrogen bond was calculated with DFT calculation. In the calculation, several trimer models were made and the enthalpy of H-hydrogen bond was evaluated (**Figure 1**). As a result, the corporation of PA into PBI reduced the resonance effect and thus increased the chance for H-bond to occur, the higher amount is the H-hydrogen bond, the higher is the interaction enthalpy.

	PBI-PBI	PBI-PBO	PBI-PA	PA-PA
H-donor	BI	BI	BI	BA
H-acceptor	BI	BO	BA	BA
Interaction enthalpy [kcal/mol]	-13.32	-9.23	-10.24	-6.85

Figure 1. The interaction enthalpy of hydrogen bond in several models in the calculation.

This calculation result uncovered the mechanism of the high thermal stability of the synthesized terpolymers. All the DFT simulations were carried out using Gaussian 16. To properly describe the charge transfer relevant to the H-bonds, CAM-B3LYP was chosen as the exchange-correlation functional, associating with the cc-pVQZ basis set. A basis-set superposition error was reduced by applying the counterpoise correction to optimize the geometries.

Published papers:

None

Obtained budget:

None

ポリイミドの耐熱性と酸素透過率の量子化学論的予測に関する研究

所属・氏名 マテリアルサイエンス系・只木哲（金子研究室）

使用計算機: PC cluster system (GPU, vpc)

【緒言】

エチレン・ビニルアルコール共重合体やポリ塩化ビニリデン等のプラスチックはガスバリア性に優れているが、耐熱性と耐水・耐油性の低さや塩素による環境負荷の問題がある。一方、ポリイミドは剛直な分子構造を持つため、優れた化学的・物理的性質・電気絶縁性を有する。中でもイミド結合は極性が高く、強い分子間力を持つため、ポリイミド分子鎖が互いに密に充填される。従って、ポリイミドは優れた酸素ガスバリア材料としてのポテンシャルを持つ一方で、それらの用途としては注目されていない状況にある。

ポリイミドの高耐熱性を維持したまま低い酸素透過率を与える分子設計として、高分子鎖の極性や分子間力、自由体積などを複合した要因を考える必要がある。本研究では、計算科学を用いて、ハンセン溶解度パラメータ算出ソフトウェア「HSPiP」¹⁾と量子化学計算プログラム「Gaussian」により、酸素透過率の低い高耐熱ポリイミドの構造最適化および側鎖官能基が酸素透過率に与える影響を明らかにすることを目的とする。

【結果】

HSPiP を用いて、ポリイミドの分子間力を三つのパラメータ（分散力、極性および水素結合）と総合溶解性パラメータで評価し、それらのパラメータを用いたポリイミド（Figure 1）の酸素透過率を予測した（Table 1）。その結果、アミノ基、ヒドロキシ基などの極性の高い官能基の導入により、ポリイミドの総合溶解性パラメータが高くなり、酸素透過率が低くなった。

これは、極性官能基の導入により、ポリイミド分子間の相互作用がより強くなったことに由来する。その結果、凝集エネルギー密度が増加し、自由体積が減少することで、ポリイミド分子鎖のミクロブラウン運動が抑制され、高分子中での酸素分子の透過が困難になったと考えられる。

関連発表論文

1) 該当なし

関連取得研究費（もしあれば）

1) 該当なし

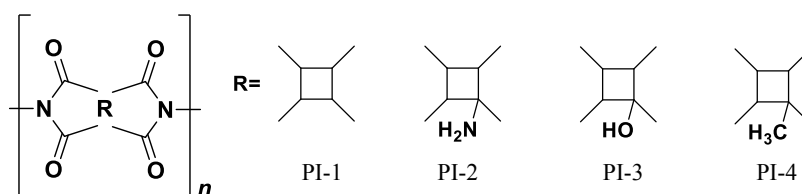


Figure 1. Polyimide structure with various functional groups bonded to cyclobutane

Table 1. Polyimide solubility parameter and oxygen permeability

Polyimide	δ_D	δ_P	δ_H	δ_{tot}	$\ln(P_{O_2})$
PI-1	24.3	14.5	7.70	29.3	-5.41
PI-2	25.2	14.2	9.50	30.4	-6.58
PI-3	25.0	14.9	13.2	32.0	-7.19
PI-4	23.6	12.4	6.60	27.4	-4.26

δ_D : Dispersion term is van der Waals force; δ_P : Polarity term is dipole moment force; δ_H : The hydrogen bond term is the hydrogen bond force. Unit: MPa^{1/2}

「相変化材料を用いた光スイッチの相変化状態制御に関する研究」

石川工業高等専門学校・佐野陽之

JAIST ナノマテリアル・デバイス研究領域・水谷五郎

使用計算機： Kagayaki

<目的>

相変化材料の自己保持性を利用した“高速で低消費電力な光スイッチ”（相変化光スイッチ）の開発が進められている。これまでの研究において、「相変化材料の相状態がよく分からず、予想される性能が出ない」「挿入損失が大きい」などの問題が生じている。そのため、本研究では、「光スイッチ動作の完全な理解」と「低損失な相変化材料の提案」を行う。

<内容および研究成果（状況）>

○相変化シミュレーション

相変化材料 GST ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$) を用いた光スイッチ動作を完全に理解するため、光スイッチ動作の時間スケール（数 10～数 100ns）での実験結果を正しく再現できる「リアルな GST 相変化シミュレーションモデル」の開発を行っている。2021 年度は、GST の過冷却的挙動をシミュレーションに組み込み、急冷時のアモルファス化をよりリアルに再現できるようにした。GST 相変化部分のシミュレーション開発はほぼ完了したので、実際の相変化光スイッチデバイスの動作を解析するため、「電気伝導、ジュール熱発生、熱拡散、相変化、光伝搬」の物理現象を含む総合的な相変化光スイッチシミュレーションシステムを構築した。試作デバイスの構造を元に、シミュレーションを行ったところ、GST の結晶化によるスイッチ Off 動作とアモルファス化によるスイッチ On 動作を再現できた。詳細な解析から、GST 層の過熱が不均一であるため、急冷中の再結晶化が顕著に発生し、また GST 層および ITO ヒーター層に熱的損傷が生じる可能性があることが分かった。今後は、GST 層の不均一な加熱を改善するための光スイッチの構造を検討していく予定である。

○低損失な相変化材料の探索

GST は実験的に扱いやすい相変化材料であるが、光損失が大きいという欠点を持っている。そこで、光吸収が小さい相変化材料を探索し、MnTe が有望であることが分かったため、第一原理計算によって MnTe の相変化機構の解明と相変化による物性変化を調べる研究を始めた。MnTe は多くの結晶構造を持つ磁性半導体であり、高速に相変化が起こることが知られている。現在、熱的に最も安定な α -MnTe の文献調査を行い、計算手法や計算パラメーター等の情報を収集し、予備的な第一原理計算を始めた。構造最適化による格子定数の決定、エネルギーバンド図、誘電率などの計算結果が得られ、その妥当性について検討を行っている。なお、この第一原理計算に関する研究は、JAIST 応用物理学領域の水谷教授との共同研究に基づいて実施している。

<研究業績等> 本研究に関連する研究発表等を以下に示す。

- 1) H. Sano, M. Kuwahara, “Realistic Simulation Model of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ Phase Change Alloys for Optical Device”, International Symposium on Imaging, Sensing, and Optical Memory 2021 (ISOM' 21), online, October 3-6, 2021. Poster presentation Tu-A-08 (2021.10.5).
- 2) 佐野陽之、桑原正史、“相変化材料を用いた光スイッチ動作の連成物理シミュレーション”
応用物理学学会学術講演会 2022年3月22日（オンライン）22a-D215-5.

<関連取得研究費>

- 1) 科研費基盤研究 (C) 「相変化光スイッチの相変化状態制御の理論解析と最適なデバイス構造・材料の探索」令和2年度～5年度、研究代表者：佐野陽之

分子動力学シミュレーションを用いたヘロナミド類の膜内構造と結合特性

所属・氏名：北陸大学薬学部・齋藤大明

使用計算機: Kagakayki

【序論・方法】

ヘロナミド (Heronamide)C および A は、オーストラリア近海で採取された放線菌が生産するマクロラクタム化合物で、細胞膜への結合による抗真菌作用がある¹。掛谷・西村等は同族の放線菌から 8-deoxyheronamide C を単離し、細胞脂質を標的とした抗真菌活性を有することを報告した¹。一方でヘロナミド A はヘロナミド C に比べて脂質膜への結合特性が非常に弱いことも示されている。このようなヘロナミドの脂質膜への結合特異性の違いは、ヘロナミド C および A の脂質膜内における結合構造や相互作用特性の違いによるものと考えられるが、膜内分子構造の観測の難しさにより未だ明らかとされていない。近年、叶等は同様に細胞膜の抗菌活性を有する様々なヘロナミド類の合成研究を精力的に進めている²。抗菌活性を有する新規化合物の合成・評価のためにはこれら化合物の膜内における構造特性の知見が必須であり、これら特性の解明は急務の課題である。本研究では、これら実験により合成・評価されているヘロナミド類の脂質膜における分子動力学 (MD) シミュレーションを実施し、ヘロナミド類の膜内結合特性を明らかにする。ヘロナミド C, や A 単体の脂質膜における MD 計算に加えて、叶等が合成したヘロナミド類の脂質膜における MD 計算を実施する。各々の化合物の膜内における結合位置や分子配向の違いを詳細に解析し、ヘロナミドの膜内における構造や凝集特性の違いについて議論する。

【方法】図 1 に本研究で取り扱うヘロナミドの分子構造を示す。

これらヘロナミドを DMPC を 128 個、水分子を 8192 で構成する脂質二重層膜に 1 分子だけ存在する系と、20 %濃度で存在する系を作成し、各々の系での膜内構造と、膜への結合特性評価を MD シミュレーションによって評価した。

MD シミュレーションは全て定温・定圧条件下(T=303K, P=1atm)で実行した。脂質の力場には CHARMM36 を用い、水のモデルは TIP3 を用いた。ヘロナミドの DMPC 膜への結合特性の評価には、アンブレラサンプリングによる膜厚方向に対する PMF 計算によって評価した。反応座標は z 軸 (膜厚方向) とし、ヘロナミド分子の水酸基を膜内中心方向に移動させた場合と、膜外方向に移動させた場合の PFM を DMPC の膜からの離脱エネルギー曲線と定義して計算を行った。MD・PMF 計算には GROACS2018 を用いた。

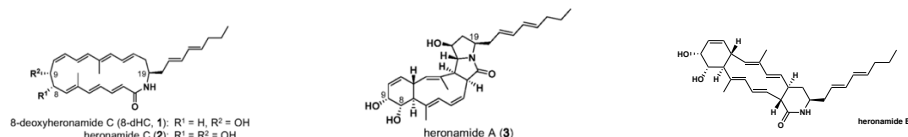


図 1. 8-deoxyheronamide C, heronamide C, heronamide A, heronamide B の分子構造

【結果と考察】図 2 に DMPC 膜に(a) heronamide C と(b) heronamide A を 1 分子挿入した系における構造のスナップショットを示す。heronamide C は 2 つの水酸基を膜の極性基領域に向けて配向する結果が示されたが、heronamide A の場合は、膜圧方向に対して大きくチルトして配向する様子が示され、膜内における配向特性の違いが示された。

Activity Report FY2021

1. **Research title:** Capturing Concentration Induced Aggregation of Nucleobases on Graphene Surface Through Polarizable Simulations

Principle Investigator: Sairam Swaroop Mallajosyula

Affiliation: Associate Professor, Indian Institute of Technology Gandhinagar

Machine: Kagayaki

2. Project Description: Nucleobases have attracted significant attention from the scientific community, as a viable candidate for the formation of supra-molecular assemblies. Significant research interest has been turned towards developing novel molecules based on nucleobase synthons, for applications in a wide spectrum of disciplines. Self-assembly of nucleobases on solid support have been observed in experimental studies, but have not been captured by molecular dynamics simulations. We show that a polarizable force field can accurately capture the spontaneous self-assembly of higher-order structures in cytosine nucleobases which cannot be captured by non-polarizable force fields. A gradual transition from an ordered 2D network to a sizeable disordered network of hydrogen-bonded structures was observed upon increasing the concentration of nucleobases from 0.25M to 0.75M. Graphene sheet was found to exert a significant influence on the stabilization of self-assemblies formed by cytosine nucleobases mediated by the π - π interactions. This methodology can be extended to investigate the self-assemblies of other small molecules on graphene based solid support.

3. Publication list during FY2021 using JAIST Facilities:

- i) Capturing Concentration Induced Aggregation of Nucleobases on Graphene Surface Through Polarizable Simulations, Hemanth H., Pradeep K. Y., Mallajosyula S. S., Journal of Physical Chemistry C (Under Review)

4. Co-Authoring projects:

This work was supported by the joint research with Dr. Takumi Yamaguchi (School of Materials Science, JAIST). In FY2022 we plan to investigate the applicability of Graphene Nanopores in sequencing DNA using Drude Polarizable FF simulations. The results obtained by the work carried out in FY2021 forms the basis of our work.

4. 知識科学分野の計算サーバ利用研究

The Impact of Virtual Reality on Gaming Experience: A Perspective from Half-Life on Steam

School of Knowledge Science, Fujinami Lab, YU Fangyu

Machine: kagayaki

Abstract

As a new form of human-computer interaction, Virtual Reality (VR) introduces new opportunities for game development. Nevertheless, research conducted on the influence of VR on player reviews data was limited. This paper analyzes the influence of VR on the player community of the Half-Life series, including Half-Life 2 (non-VR edition) and Half-Life: Alyx (VR edition) by topic modeling. Particularly, a dataset of approximately 100,000 reviews was first collected from Steam. Then we used the topic modeling, and three experts were involved in analyzing these topics to categorize reviews into 11 topics of Half-Life: Alyx (Fig. 2). We also detected the pivotal insight that most game players are concerned with only five topics of fundamental game elements. Furthermore, players' positive ratings were compared on these five topics (Fig. 3), and the p-value of the two-sample t-test reveals VR has no significant impact on these fundamental game elements.

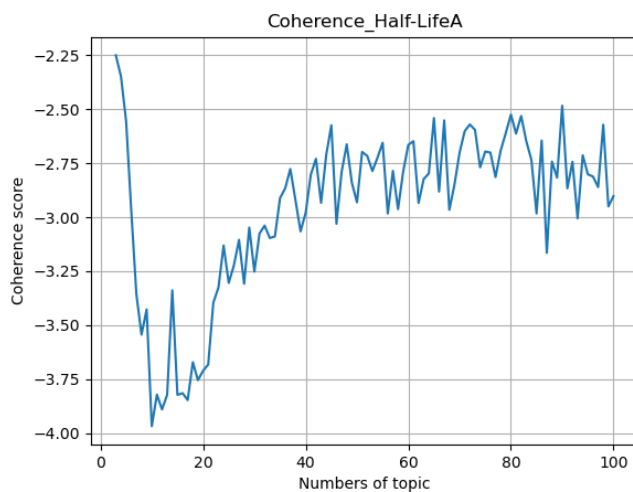


Figure 2. Coherence score of HLA.

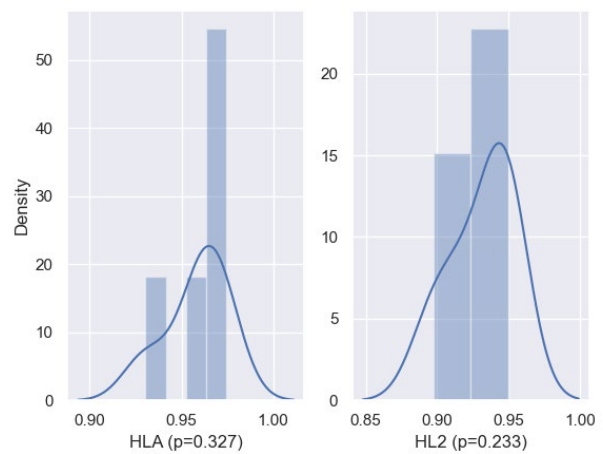


Figure 3. Positive rate distributions of top five topics

We perform a two-sample t-test with a significance level of 0.05 to see whether the positive rate means of the two games are equal or not. Because the p-value of our test (0.069165) is greater than $\alpha = 0.05$, we reject the hypothesis which assumes the two positive rate means are not equal. In other words, we do not have sufficient evidence to conclude that the positive mean rate between the two games is different.

Published papers:

- 1) The Impact of Virtual Reality on Gaming Experience: A Perspective from Half-Life on Steam

Esports Game Updates and Player Perception: Data Analysis of PUBG Steam Reviews

School of Knowledge Science, Huynh Lab, YU Yang

Machine: kagayaki, vpcc

Abstract

Game updates are essential because they usually contain critical patches to improve the players' experience. Compared with traditional online games, esports games abandon the storyline and emphasize the players' competitive motivation. As a result, esports games need to be updated more frequently to extend the game development life cycle. Meanwhile, developers get feedback from players' reviews on esports games to improve the game experience, services, or adjust operating strategies. However, there has been little research conducted on the influence of esports game updates on player reviews. In this study, we aim to determine the influence of the monthly update on the player community by carrying out an analysis of PUBG, one of the representatives of esports games, via topic modeling. In total, we collect approximately 300,000 reviews on Steam. Our contributions in this paper are: (i) we use the LDA model to infer and group reviews into 14 topics (Fig. 2), (ii) we analyze the influence of esports game updates on topics prevalence over time (Fig 4.), and (iii) we conduct sentiment analysis to reveal players' satisfaction levels with each topic.

(Part of the result):

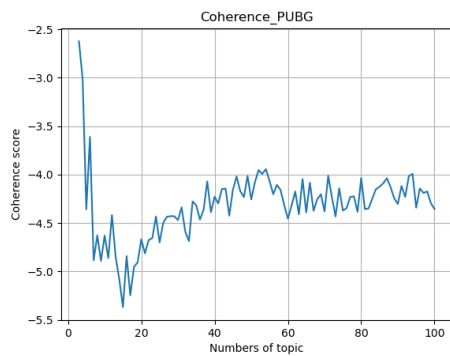


Figure 2. Coherence scores of PUBG.

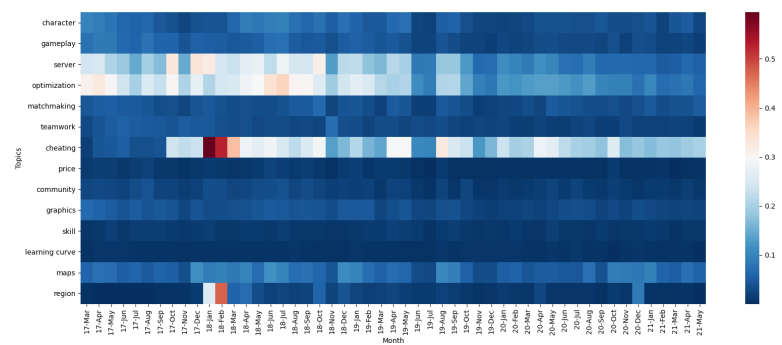


Figure 4. Topics prevalence over time

Published papers:

- 1) Yu, Y., Nguyen, B.H., Yu, F. and Huynh, V.N., 2021, November. Esports Game Updates and Player Perception: Data Analysis of PUBG Steam Reviews. In *2021 13th International Conference on Knowledge and Systems Engineering (KSE)* (pp. 1-6). IEEE.

2)

Obtained budget (If you got.)

1)

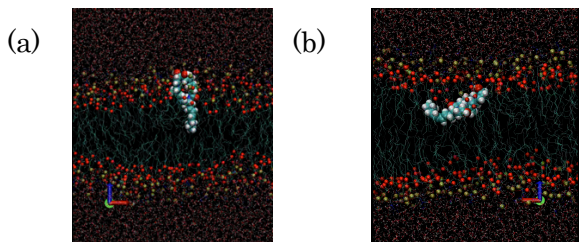


図 2. (a) heronamide C と (b) heronamide A のスナップショット

図 3 に各々のヘロナミド分子の膜厚方向に対する PMF 計算の結果を示す。自由エネルギー値の比較の結果、膜からの離脱のエネルギー障壁では heronamide A < heronamide C となり、heronamide A の弱い膜結合特性が PMF 計算より示された。これらは生物活性の評価実験と対応する結果であり、シミュレーションや PMF 計算の正当性を示す結果である。

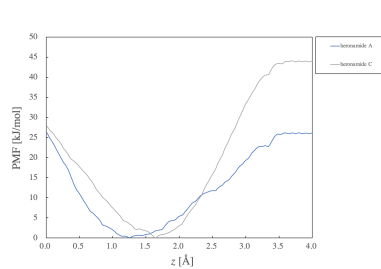


図 3. heronamide A と C の膜厚方向に対する PMF 計算

関連発表論文（査読あり）

- 1) Kazutomo Kawaguchi, Seiichiro Ito, Hiroaki Saito, Hidemi Nagao, “Molecular dynamics study of lipid bilayer asymmetry induced by ion concentration gradient and electronic polarizability”, *Molecular Simulation* (2022) 48:6, 477-483.
- 2) Naoki Kanoh, Ryusei Terashima, Hiromichi Nishiyama, Yuta Terajima, Shota Nagasawa, Yusuke Sasano, Yoshiharu Iwabuchi, Hiroaki Saito, Syusuke Egoshi, Kosuke Dodo, Mikiko Sodeoka, Chengqian Pan, Yoshinobu Ikeuchi, Shinichi Nishimura, and Hideaki Kakeya, “Design, Synthesis, and Antifungal Activity of 16,17-Dihydroheronamide C and ent-Heronamide C”, *The Journal of Organic Chemistry* (2021) 86 (23), 16249-16258.
- 3) Rina Saito, Kengo Hayashi, Haruna Nomoto, Misuzu Nakayama, Yousuke Takaoka, Hiroaki Saito, Souhei Yamagami, Toshiya Muto & Minoru Ueda, “Extended JAZ degron sequence for plant hormone binding in jasmonate co-receptor of tomato SICOI1-SlJAZ”, *Scientific Reports* volume 11, Article number: 13612 (2021).

4. 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致します。