

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 2023
Author(s)	本郷, 研太; 宮下, 夏苗; 井口, 寧
Citation	Technical memorandum (Japan Advanced Institute of Science and Technology), TM-2024-001: 1-42
Issue Date	2024-07-26
Type	Others
Text version	publisher
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/19324">http://hdl.handle.net/10119/19324</a>
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)

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 2023

本郷 研太, 宮下 夏苗, 井口 寧 編  
2024 年 7 月 26 日  
TM-2024-001

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、2023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

CuCrO<sub>2</sub> バッファと Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 基盤上で成長する PdCrO<sub>2</sub> 薄膜における  
不純物相形成メカニズムの解析  
市場 友宏

LaMO<sub>3</sub>型ペロブスカイト中アンチサイト自己点欠陥の量子拡散モンテカルロ法  
による存在予見  
市場 友宏

量子拡散モンテカルロ法用途の有効核電荷の開発  
市場 友宏

無秩序なイオン配置パターンに伴う複数の Ce<sup>3+</sup>の発光スペクトル  
市場 友宏

First-principles calculations of pressure dependence of superconductivity  
in Lanthanum-Thorium hydrides  
Song Peng

Substitutional Doping Strategies for Fermi Level Depinning and Enhanced Interface  
Quality in WS<sub>2</sub>-Metal Contacts  
Abdul Ghaffar

Ce:Ca<sub>5.7</sub>Y<sub>1.3</sub>Si<sub>7</sub>O<sub>16.7</sub>N<sub>3.3</sub> 蛍光体のマルチエミッション機構の第一原理解析  
奥村 健司

Computational Discovery of High Thermal Conductive Polymer Crystals Using  
Physics-Informed Screening and Phonon Calculation  
Rohit Sanjay Dahule

Ab-initio Study of Direct Methane Conversion to Methanol on Multiple Catalyst  
Types  
Reza Pamungkas Putra Sukanli

Diffusion Monte Carlo Study of High-Pressure Solid Hydrogen Phase  
Putu Bhargo Abhimana Chrysnanda

金属硫化物系電子化物におけるデータ駆動型超伝導体探索  
Qi Huan

First-principles study of chalcogenide perovskite for solar cell applications.  
Hasan Sayed Sahriar

等モル量ハイエントロピー合金の結晶構造決定因子探求  
水関博志

GPU における疎行列密ベクトル積 (SpMV) の高速化のための疎行列格納形式に  
関する研究  
村上舜

Large Language Model-based cybersecurity research  
Trong Khang Mai

Study on blind estimation of room acoustic and physical parameters  
Wang Lijun

### **3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバー利用研究 31**

Ziegler-Natta 触媒の非経験的構造決定に関する研究  
筑間弘樹, DA SILVEIRA João Marcos, 和田透, 藤原彩, 谷池俊明

コレステリル基を有するポルフィリンの合成と超分子ポリマーの  
高速 AFM イメージングと全原子 MD シミュレーション  
堀諒雅, 篠原健一

分子シミュレーションを活用した糖鎖-タンパク質相互作用の  
ダイナミクスの解析  
山口拓実

熱電材料の電子・フォノン輸送に関する研究  
宮田全展

「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, 水谷五郎, 安東秀

分子動力学シミュレーションを用いた脂質フリップを誘起する  
膜貫通ペプチド二量体の膜内構造解析  
齋藤大明

原子層積層構造のバンド構造の計算  
北川雄真

Zeeman 効果を利用したスピンドバイスに関する研究  
小松颯, 赤堀 誠志

Cross-linkable Sulfonated Polyimide Thin Film with High Proton Conductivity  
Yao Yuze

### **4. 謝辞 42**

## 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。各ユーザー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。

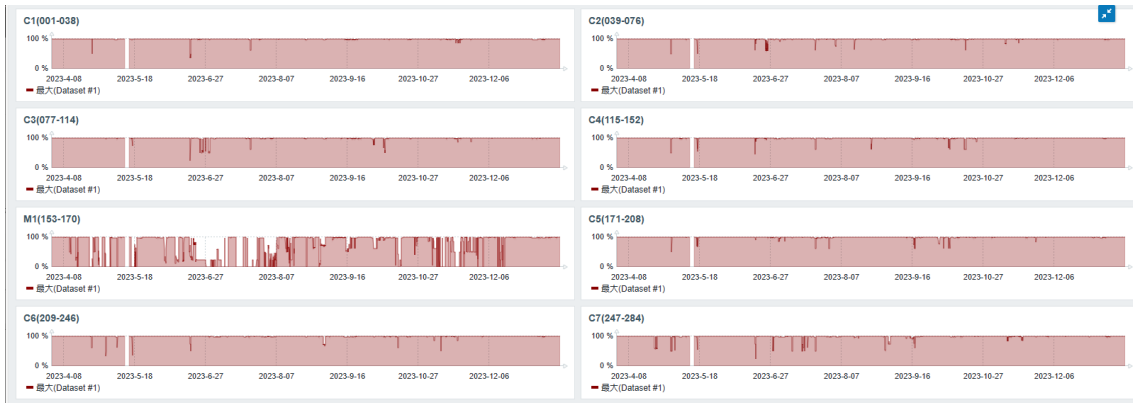
### 1.2 システム構成

JAIST 共有計算サーバ環境は、HPC(High Performance Computing)-AI(Artificial Intelligence)研究用計算機システム“KAGAYAKI”(CPU/GPU)と汎用 PC クラスタ計算機システムから構成される。前者は、科学技術計算などの HPC 利用を想定した CPU 計算機ノードと AI・機械学習研究利用を想定した GPU 計算機ノードから構成されており、後者は、汎用的な CPU 計算機ノードと一部大容量メモリを搭載した CPU 計算機ノードから構成され、初学者でも容易に大規模並列計算を実行できる並列計算機環境を提供し、KAGAYAKI システムへの導入機と位置付けられる。

今年度は、汎用 PC クラスタ計算機システムがリースアップとなり、表 1 に示す構成となっている。図 1 に各システムの利用状況を示す。KAGAYAKI システムでは、CPU・GPU 計算ノードともに利用率が高く、特に GPU 計算ノードは、2021 年度の更新以来、前システムから NVIDIA A100 系ノード 10 台と A40 系ノード 20 台へと大幅に増加したが、全ノードにおいて使用率はほぼ 100%であり、本学の AI/機械学習研究の需要[20,21]に応えることができたと考えられる。また汎用 PC クラスタ計算機システムでは、リース期限間際の 2 月のサービス終了に伴い、利用率は大幅に減少しているが、KAGAYAKI への移行を促す案内の周知に努めた結果、ユーザーからのトラブル報告や苦情はなく、円滑な計算環境の移行ができたと考えられる。

表 1. JAIST で利用可能な計算サーバ群(2023)

KAGAYAKI システム CPU 計算ノード構成	
CPU ノード計算機	Dell PowerEdge R6525
CPU	AMD EPYC 7H12 2.6GHz 64Cores x 2 Sockets
メモリ	512GB (32GB DDR4/3200 SDRAM×16)
ノード総数/全 CPU 数/全コア数/主記憶容量	280 ノード/560 CPUs/35,840 Cores/143.3TB
総理論演算性能	1.48PFLOPS
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)
KAGAYAKI システム GPU 計算ノード構成	
GPU ノード計算機(GPU-1 & GPU-2)	Dell PowerEdge R750
CPU	Intel Xeon Gold 5329 2.2GHz (26-core×2)
メモリ	512GB (32GB DDR4/3200 SDRAM×16)
GPU-1/GPU-1 ノード総数	NVIDIA A100 x 2/10 ノード
GPU-2/GPU-2 ノード総数	NVIDIA A40 x 2/20 ノード
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 28 日(予定)
汎用 PC クラスタ 計算機システム構成	
汎用 PC クラスタ	HPE ProLiant DL560
CPU	Intel Xeon G-6242 2.8GHz (16-core)×4
メモリ	1.5TB
ノード総数/全 CPU 数/全コア数/主記憶容量	30 ノード/120 CPUs/1920 Cores/45TB
大容量メモリノード S	HPE Superdome Flex
CPU	Intel Xeon G-6240M 2.6GHz (18-core)×8
ノード総数/全 CPU 数/全コア数/主記憶容量	1 ノード/8 CPUs/144 Cores/12TB
大容量メモリノード L	HPE ProLiant DL560
CPU	Intel Xeon G-6140 2.6GHz (18-core)×4
ノード総数/全 CPU 数/全コア数/主記憶容量	1 ノード/4 CPUs/72 Cores/6TB
開発環境(Fortran/C/C++)	GNU/PGI Compiler/Intel Parallel Studio XE
運用期間	2019 年 3 月 1 日～2024 年 2 月 28 日



GPU Mem. Utilization - All GPU Machines(Max)

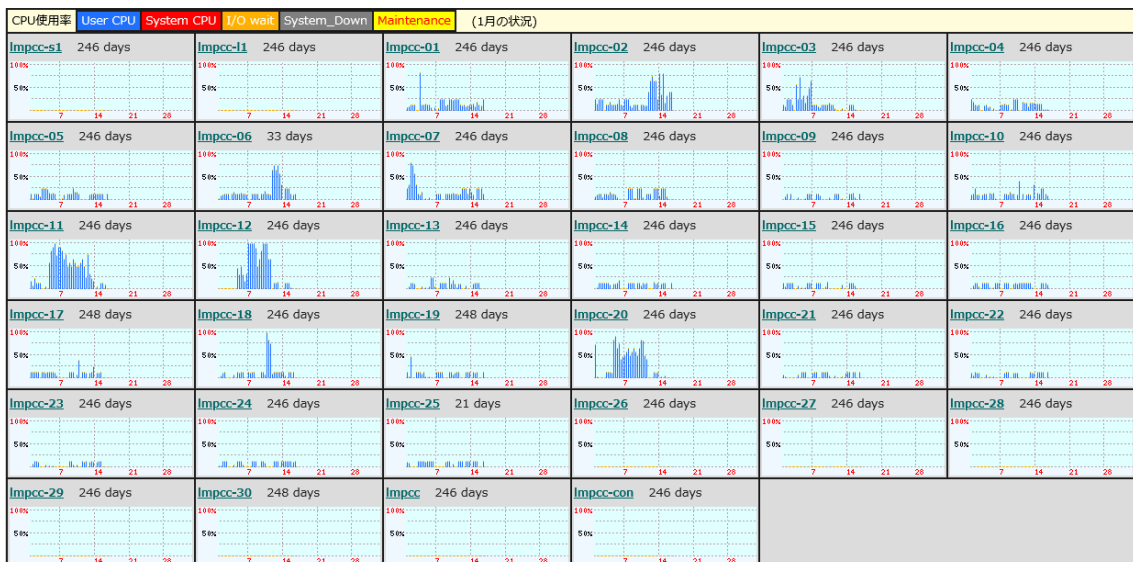
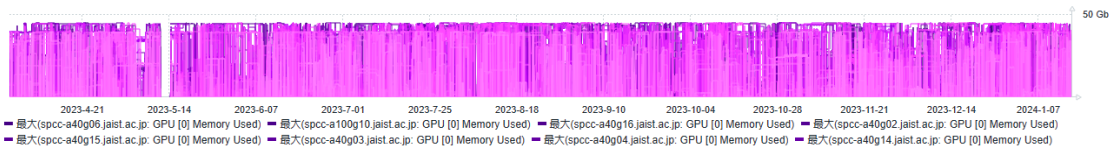


図 1. KAGAYAKI システムの年間利用状況 : CPU ノード(上段)と GPU ノード(中段)の年間利用状況(2023 年 4 月~2024 年 3 月), 及び, 汎用 PC クラスターシステムの 2023 年 1 月の利用状況. KAGAYAKI システムでは, 1 日毎の CPU/GPU 使用率の最大値を表示している. 汎用 PC クラスターシステムでは, 1 時間毎の CPU 使用率の最大値を表示している.

### 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・機械学習などで利用可能なソフトウェアとしては、MATLAB(商用)が利用できる。また、Tensorflow, Pytorchなどの公開されている各種ツール、フレームワークをコンテナとして計算機上に展開することができる。なお、これらのコンテナ環境は、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(2023)

ソフトウェア	概略	KAGAYAKI		汎用 PC クラスター
		CPU	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 2023 年度の活動

2023 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。今年度も感染対策に関する本学対応方針に従うとともに、社会人学生にも参加しやすいよう昨年度に引き続き、ハイブリッド開催とした。年間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、並列化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。2023 年度は、近年の機械学習に関する研究開発へのニーズの高まりに応じた大容量メモリの取り扱いに

必要となるコンパイルオプションやジョブの実行法などに加え、利用者の多い Python 環境についても、Singularity コンテナにおける Python 仮想環境のローカル環境依存など重要な特性について解説し、理解を深めることに主眼をおいた。特に Singularity コンテナが計算環境の展開手段として一般的になりつつある昨今において、混乱を招きやすい Python 仮想環境との関連性を予め解きほぐし、理解を促すことが有効であると考えられる。

また今年度においても、本学で包括契約により全学サービスしている MATLAB の利用者拡大を目的に、MATHWORKS 社と本学学生アンバサダーからの尽力により複数回の MATLAB セミナーを実施することができた。本セミナーは、MATLAB の基礎的な内容と活用事例を座学で学び、データ解析や可視化などをハンズオン形式で操作しながら体験できる内容となっていた。今後も、本学でサービス提供しているソフトウェア全般に対して、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. 2023 年度に開催した講習会

開催月	講習会
2023 年 6 月 13 日	大規模計算機利用オリエンテーション
2023 年 6 月 15 日	計算機講習会 [KAGAYAKI:1] ～ 並列化とアプリケーション ～
2023 年 6 月 16 日	計算機講習会 [KAGAYAKI:2] ～ GPU + Jupyter Notebook ～
2023 年 6 月 19 日	計算機講習会 [LMPCC] ～ メモリの意外な注意点 & Python ～
2023 年 9 月 15 日	Introduction to MATLAB
2023 年 10 月 25 日	大規模計算機利用オリエンテーション
2023 年 10 月 30 日	計算機講習会 [KAGAYAKI:1] ～ 計算機基礎編&アプリケーション ～
2023 年 10 月 31 日	計算機講習会 [KAGAYAKI:2] ～ GPU + Jupyter Notebook ～
2023 年 11 月 7 日	計算機講習会 [LMPCC] ～ メモリオプションとコンテナ with venv ～
2023 年 12 月 15 日	Navigating the AI Landscape with MATLAB

## 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 2023」は 2023 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 17 件、材料科学分野から 9 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、最先端の科学・技術分野では、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った。従って、最先端の計算機システムは、その一翼を担う高等教育機関として最先端の教育研究活動を開拓、実施、展開するための研究基盤として、その重要性を増している。本学におけ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につながる。その結果として、本学における新しい教育研究展開の潮流を知ることにもできる。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、2020年度導入の KAGAYAKI システムの CPU ノードに、2021年度導入の GPU ノードが加わることで、従来の HPC 研究分野のみならず、AI・機械学習系研究分野をも包括する計算機環境を整備することができた。KAGAYAKI システムが本学の HPC・AI・機械学習研究を大いに発展させる原動力であることに疑念の余地はなく、今後も継続して、ユーザーに寄り添った質の高い計算機システムサービスを提供できるよう、最新の研究動向をハードとソフトの両面で常に把握しながら、次期システム更新の選定指針を学内で広く議論していきたい。

今年度は、汎用 PC クラスタ計算機システムが 2024 年 2 月にリース終了となり、その主要サブシステムである大容量メモリノード S (HPC Superdome Flex /12TB) は更新されず、また残りのサブシステムは、並列計算機群としてではなく、計算機資源を有効活用するための「研究クラウド基盤システム」として更新された。当該システムを発展させていくことで、本学の教育研究における多様な要求に柔軟に対応可能な計算システム環境を提供できるものと期待している。

## 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, 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).
- [22] 本郷 研太, 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 2021”, 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-2022-001, (2022).

## 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、原著論文 13 件、解説記事 3 件、学会発表等 4 件 (内招待講演 4 件) を報告した。第一原理計算を活用した材料物性解析やデータ駆動型構造探索手法による新規化合物相の探索を行い、また新学術領域「複合アニオンの創製」に関する共同研究プロジェクトで 6 件の原著論文を報告している。これらの計算では、主として、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、本学マテリアルサイエンス系の実験グループとの学内共同研究の成果として原著論文を 3 件報告しており、うち 2 件は本学プレスリリース記事として紹介されている。

#### 研究業績(原著論文・査読あり)

- 1) T. Hangai, T. Hasegawa\*, X. Jian, N. Takayuki, T. Takeda, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono, T. Goto, Y. Sato, A. Okawa, S. Yin, "Key Role of Metal-to-Metal Charge Transfer Transition between  $\text{Mo}^{6+}$  and  $\text{Bi}^{3+}$  for Enhancement in NIR Luminescence of  $\text{Gd}_2\text{MoO}_6\text{:Bi, Yb}$  Nanophosphor", **J. Phys. Chem. C** 128, 3351-3360 (2024).
- 2) P. Song, A. Durajski, Z. Hou, A. Ghaffar, R. Dahule, R. Szczesniak, K. Hongo, R. Maezono, "(La,Th) $\text{H}_{10}$ : the Potential High- $T_c$  (242 K) Superconductors Stabilized Thermodynamically below 200 GPa", **J. Phys. Chem. C** 128, 2656-2665 (2024).
- 3) T. Yasunaga, M. Kobayashi\*, K. Oqmhula, H. Qi, T. Ichibha, K. Hongo, S. Yamamoto, R. Maezono, M. Mitsuishi, M. Osada, H. Kato\*, M. Kakihana, "Multi-emission of  $\text{Ce}^{3+}$  from Single Crystallographic Site Induced by Disorder of Ions", **Inorg. Chem.** 63, 1288-1295 (2024).
- 4) S.P.K. Naik\*, S. Alberto, K. Kataoka, Y. Gotoh, T. Ichibha, K. Hongo, R. Maezono, T. Nishio, H. Ogino\*, "Single crystal growth and physical properties of La, Co doped (Eu,Ca) $\text{FeAs}_2$ ", **J. Cryst. Growth** 628, 127547:1-5 (2024).
- 5) T. Ichibha, Y. Nikaido, C. Bennett, J. Krogel, K. Hongo, R. Maezono, F. Reboredo, "Locality Error Free Effective Core Potentials for 3d Transition Metal Elements Developed for the Diffusion Monte Carlo Method", **J. Chem. Phys.** 159, 164114 (2023).
- 6) K.S. Qin\*, P. Song\*, K. Hongo, R. Maezono\*, "First-Principles Investigation of Stability and Superconductivity in Ternary Yttrium-Praseodymium Hydrides under High Pressure", **J. Phys. Chem. C** 127, 21242-21249 (2023).
- 7) L. Wu, I. Saitoh, K. Hongo, K. Okeyoshi\*, "Recognition of spatial finiteness in meniscus splitting based on evaporative interface fluctuations", **Adv. Mater. Interfaces** 10, 2300510:1-8 (2023). [JAIST プレスリリース: 2024/09/22]
- 8) C. Liu, K. Hongo, R. Maezono, J. Zhang\*, Y. Oshima\*, "Stiffer Bonding of Armchair Edge in Single-Layer Molybdenum Disulfide Nanoribbons", **Adv. Sci.** 10, 2303477 (2023). [JAIST プレスリリース: 2024/09/19]
- 9) T. Kato, Y. Iwasa, S.P.K. Naik, S. Ishida, Y. Higashi, I. Hase, T. Nishio, K. Hongo, R. Maezono, H.

- Ogino\*, "Structure, Optical, and Electrical Properties of Layered Oxychalcogenide  $\text{Sr}_2\text{ZnCu}_2(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_2\text{O}_2$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) Compounds", **Mater. Res. Express** 10, 095904 (2023).
- 10) R. Biyani, K. Hirata, K. Oqmhula, A. Yurtsever, K. Hongo, R. Maezono, M. Takagi, T. Fukuma\*, M. Biyani\*, "Biophysical Properties of the Fibril Structure of the Toxic Conformer of Amyloid- $\beta$ 42: Characterization by Atomic Force Microscopy in Liquid and Molecular Docking.", **ACS Appl. Mater. Interfaces** 15, 27789–27800 (2023).
- 11) D. Kato, P. Song, H. Ubukata, H. Taguro, C. Tassel, K. Miyazaki, T. Abe, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono\*, H. Kageyama\*, "Evolutionary Algorithm Directed Synthesis of Mixed Anion Compounds  $\text{LaF}_2\text{X}$  ( $\text{X} = \text{Br}, \text{I}$ ) and  $\text{LaFI}_2$ .", **Angew. Chem. Int. Ed.** 62, e202301416 (2023).
- 12) P. Song\*, M. Khawaguch, Y. Masubuchi, K. Oqmhula, K. Nakano, R. Maezono, K. Hongo\*, "High-pressure phases of  $\text{BaCN}_2$  explored using a genetic algorithm", **Comput. Mater. Sci.** 226, 112202 (2023).
- 13) A. Raghav\*, R. Maezono, K. Hongo, S. Sorella, K. Nakano\*, "Toward Chemical Accuracy Using the Jastrow Correlated Antisymmetrized Geminal Power Ansatz.", **J. Chem. Theory Comput.** 19, 2222 (2023).

#### 研究発表実績

- 1) Kenta Hongo (Invited Talk), "Data-driven Materials Research: Exploration and Characterization", 2nd International Symposium on Materials R&D Data, 2023/7/17-18, Wiesbaden, Germany.
- 2) 本郷研太 (招待講演)、「JAIST スパコンを活用した、超越バイオメディカル DX 開発」、川崎市産業振興財団 第 2 回 JAIST シーズ紹介セミナー、2023 年 9 月 29 日、オンライン
- 3) Kenta Hongo (Invited Talk), "Data-driven Materials Search Combined with Materials Simulations", International Symposium on Materials Informatics 2023, 2023/12/8, JAIST, Nomi, Japan
- 4) 本郷研太 (発表者・招待講演)、宋鵬、奥村健司、市場友宏、前園涼、「複合アニオン化合物の計算材料科学とデータ科学～蛍光体系を中心に～」、極限的励起状態の形成と量子エネルギー変換研究グループ 第 14 回研究会 (兼 第 30 回次世代先端光科学研究会)、2024 年 2 月 8 日、静岡大学

#### 研究費獲得実績

- 1) 令和 5 年度科研費・学術変革 (A) (公募研究)、「超セラミックスのデータ科学的構造探索と DX データベース構築 (研究代表/23H04623)」、R5 年度 1,300 千円 (R5 年～R6 年)。
- 2) 令和 4 年度科研費・基盤研究 (B) (一般)、「準安定な酸水酸化物結晶の創製と水酸基化学への展開 (研究分担/研究代表者：稲田幹/22H02170)」、R5 年度 500 千円 (R4 年～R6 年)。
- 3) 令和 3 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：桶菫 興資/21H01998)」、R5 年度 500 千円 (R3 年～R6 年)。
- 4) 令和 3 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)」、R5 年度 300 千円 (R3 年～R5 年)。



# CuCrO<sub>2</sub> バッファと Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 基盤上で成長する PdCrO<sub>2</sub> 薄膜における 不純物相形成メカニズムの解析

情報科学系・市場友宏  
使用計算機: KAGAYAKI

## 概要

PdCrO<sub>2</sub> 薄膜の合成には不純物相の偏析が伴いやすく、このことが高品質な PdCrO<sub>2</sub> 薄膜の合成を妨げています。本研究では、不純物相偏析のメカニズムについて、実験と第一原理計算から解析しました。

PdCrO<sub>2</sub> 薄膜は Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 基盤上の CuCrO<sub>2</sub> バッファ層上で合成されます。その際、Cu<sub>x</sub>Pd<sub>1-x</sub> 合金とクロム酸化物(Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> と Cr<sub>3</sub>O<sub>4</sub>)が不純物相として偏析することを X 線回折および走査型透過電子顕微鏡による観測から明らかにしました。また、この不純物相の偏析が酸素欠陥により引き起こされることを第一原理計算とモデリングから明らかにしました。当該解析は、実験的に観測された「それぞれの不純物相の偏析し易さ」の温度および酸素分圧への依存性を定性的に再現しており、このことから第一原理計算とモデリングの信頼性が担保されます。

## 関連発表論文

1) T. Ichibha\* et al., *Adv. Physics Res.*, **2**, 2200080 (2023/巻号無し/新刊ゆえ IF 等未付与).

## 量子拡散モンテカルロ法用途の有効核電荷の開発

情報科学系・市場友宏

使用計算機: KAGAYAKI, LMPCC

### 概要

量子拡散モンテカルロ法は、とりわけ周期系への適用において、予見信頼性の最も高い手法として知られています。しかしながら、強相関電子系における磁気構造や超伝導機構など、電子相関評価が難しく、同時に、エネルギー予見に高精度が要求される問題に対しては、固定節近似誤差、ジオメトリ誤差、および、擬ポテンシャルにおける局所近似誤差により、十分な予見精度を担保することが困難です。このうち、固定節近似誤差とジオメトリ誤差に関しては、多行列式試行関数の利用や力場算定法の開発により克服されつつあります。一方、セミ局所型有効核電荷の角運動量射影の近似的取扱いに由来する局所近似誤差に関しては、これを軽減する方策がいくつか考えられているものの、どれも有意な改善が確認されておらず、当該誤差はセミ局所型有効核電荷を使用する限り避けようが無いものとみなされつつあります。本研究では、角運動量射影成分を量子拡散モンテカルロ法の拡散項に含めることで局所近似誤差を完全に回避することができる枠組である、擬ハミルトニアンに着目し、局所近似誤差フリーな有効核電荷を、 $3d$  遷移金属の Cr-Zn について開発しました。

### 関連発表論文

1) T. Ichibha\* et al., **J. Chem. Phys.** 159, 164114 (2023/IF=4.304/Q1).

### 関連取得研究費

1) 2024 年度 海外特別研究員

# LaMO<sub>3</sub>型ペロブスカイト中アンチサイト自己点欠陥の 量子拡散モンテカルロ法による存在予見

情報科学系・市場友宏  
使用計算機: KAGAYAKI

## 概要

LaMO<sub>3</sub>(M: 3d 遷移金属)型ペロブスカイト結晶の性質は点欠陥に大きく依存します。当該系について良く研究されている点欠陥は酸素空孔と La 及び M サイトへの不純物ドーピングですが、本研究では嫌気的条件下において La サイトを M イオンが占めるアンチサイト自己点欠陥が形成されうることを量子拡散モンテカルロ法から明らかにしました。さらに、上述の点欠陥は局所磁化を持ち、LaMnO<sub>3</sub> では欠陥準位が *p* 型導電性の獲得に寄与し得ることを明らかにしました。

## 関連発表論文

1) T. Ichibha\* et al., **Sci. Rep.** 13, 6703 (2023/IF = 4.997/Q1).

## 無秩序なイオン配置パターンに伴う複数の Ce<sup>3+</sup>の発光スペクトル

情報科学系・市場友宏

使用計算機: KAGAYAKI

### 概要

本研究では、Ce ドープした Ca<sub>5.7</sub>Y<sub>1.3</sub>Si<sub>7</sub>O<sub>16.7</sub>N<sub>3.3</sub> が、紫外線照射に対して、Ce のドープ量に応じて紫色から白色の蛍光を発することを明らかにしました。我々の知る限り、Ce のみを発光中心とする白色蛍光体はこれまでに報告されていません。

ドープされた Ce は結晶学的に 1 種類の Ca/Y 混晶サイトをほぼ選択的に占有することを第一原理計算より明らかにしました。さらに、結晶学的に同一の混晶サイトであっても、アニオンやカチオンの不規則配列により局所的に非等価なサイトとなり、これらを占有する Ce イオンがそれぞれ異なる蛍光スペクトルを与える発光中心となることで、当該系が擬似白色の蛍光を発していることを明らかにしました。

### 関連発表論文

1) T. Yasunaga et al., *Inorg. Chem.* **63**, 1288 (2024/IF=5.436/Q1).

First-principles calculations of pressure dependence of superconductivity  
in Lanthanum-Thorium hydrides

School of Information of Science,  
SONG PENG  
Machine: Kagayaki

Abstract

The recent high-pressure experimental discovery of superconductivity in (La,Y)H<sub>10</sub>, and (La,Nd)H<sub>10</sub> shows that the ternary rare-earth clathrate hydride can be promising candidate for high-temperature superconductor. In line with this, my previous work on other rare-earth metals forming ternary hydrides has revealed them to be potential high-temperature superconducting materials as well. In this work, I theoretically demonstrate that the combination of actinide-metal thorium (Th) and rare-earth-metal lanthanum (La) with hydrogen can also form some ternary hydrides with cage-like structures to be stable at 200 GPa. Using the evolutionary algorithms, I have predicted the pressure-dependent ternary phase diagram of La<sub>x</sub>Th<sub>y</sub>H<sub>z</sub>. My calculations show that the hydrogen-rich phases such as (La,Th)H<sub>9</sub> and (La,Th)H<sub>10</sub> can be thermodynamically stable below 200 GPa. More importantly, the electron-phonon coupling (EPC) calculations show that the (La,Th)H<sub>10</sub> could be the potential superconductors, of which *I4/mmm*-La<sub>3</sub>ThH<sub>40</sub> exhibits the large EPC constant  $\lambda = 2.46$  with a highest transition temperature ( $T_c$ ) of 210 K, as shown in Fig. 1. Since there are few previous studies on ternary actinide hydrides, this work would greatly stimulate the further discovery of this type of ternary hydrides and provide useful guidance for the high-pressure experiment on them.

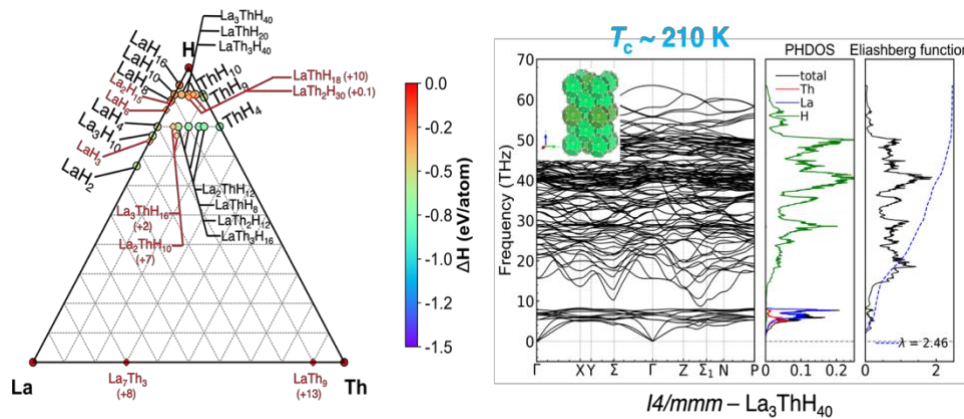


Fig. 1. The left panel is ternary convex hull of La<sub>x</sub>Th<sub>y</sub>H<sub>z</sub> at the pressure of 200 GPa. Thermodynamically stable and metastable phases are indicated by the circle and red-edge square symbols, respectively. The right panel is phonon dispersions, atom-projected and total phonon density of states (PHDOS), and Eliashberg spectral function of *I4/mmm*-La<sub>3</sub>ThH<sub>40</sub> at 200 GPa.

Published papers

- 1) P. Song, A. Durajski, Z. Hou, A. Ghaffar, R. Dahule, R. Szczyński, K. Hongo, R. Maezono, "(La,Th)H<sub>10</sub>: Potential High-T<sub>c</sub> (242 K) Superconductors Stabilized Thermodynamically below 200 GPa", J. Phys. Chem. C. **128**, 2656 (2024).

Obtained budgets

- 1) "Data scientific structure search for ternary hydride high-temperature superconductors", JPSJ/GAKUSHIN/DC2 (Research Fellowship for Young Scientists, 2021batch) (Representative [P. Song/PhD course student/2yr]; 2022.4-2024.3).

# Substitutional Doping Strategies for Fermi Level Depinning and Enhanced Interface Quality in WS<sub>2</sub>-Metal Contacts

Abdul Ghaffar,  
2120002  
Hongo Group  
Information Science  
Machine: Kagayaki

## Abstract

The evolution of high-performance computing (HPC) facilities has significantly impacted the field of material science and paved the way to revolutionize novel material discovery for various applications. Using the HPC facilities available at JAIST, we have been successfully able to conduct a rigorous analysis of two-dimensional semiconductor-metal (SM) interfaces for the next-generation device application, employing first-principles calculation into the electronic structure. Apart from gaining insights into the desirable properties of different SMs, we have also investigated the substitutional doping of WS<sub>2</sub>, an excellent 2D semiconductor for electronic application, with several non-metallic dopants (C, P, N, O, Cl, and F) for their ability to induce the lowering of p-, or n-type of Schottky barrier height (SBH) upon their contact to metal electrodes such as Ag, Au, Cu, Pd, Pt, Sc, and Ti. Our observation reveals that C, P, and N-doping can lead to Fermi level depinning (FLDP), a highly desirable phenomenon, without compromising the stability of the interface. At the same time, Cl and F-dopants can provide a path to lower the n-type SBH. Our method provides an alternate approach to induce FLDP that doesn't deteriorate the tunneling resistance, which is often the case with other interface engineering frameworks. This work can guide further experimental works in designing and accelerating the discovery of optimal and low-energy consuming 2D-semiconductor/metal interfaces.

## Publications:

- 1) "Substitutional Doping Strategies for Fermi Level Depinning and Enhanced Interface Quality in WS<sub>2</sub>-Metal Contacts", *ACS Applied Electronic Materials*, [A. Ghaffar](#), Nihar R. Mohapatra, R. Maezono, K. Hongo, *under review*
- 2) "Interface distance-dependent characteristics in TMD-metal contacts with high work function metals", [A. Ghaffar](#), R. Maezono, K. Hongo, status: *calculations finished, manuscript preparation.*

## Ce:Ca<sub>5.7</sub>Y<sub>1.3</sub>Si<sub>7</sub>O<sub>16.7</sub>N<sub>3.3</sub> 蛍光体のマルチエミッション機構の第一原理解析

所属・氏名 本郷研究室 奥村 健司

使用計算機: KAGAYAKI

### 概要

今年度は、1)ThCr<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> 型構造群を対象とする新規超伝導体の第一原理探索、2)Ce: Ca<sub>5.7</sub>Y<sub>1.3</sub>Si<sub>7</sub>O<sub>16.7</sub>N<sub>3.3</sub> 蛍光体のマルチエミッション機構の第一原理解析、3)Cobalt Carbonate Hydroxide 擬キャパシタ材料の第一原理電気化学反応解析の3テーマの研究を行った。このうち、3)について学会発表を行い、2)については原著論文[1]を出版した。本報告書では2)のテーマの結果について報告する。

マルチエミッション蛍光体を用いた単一LEDは、複数のLEDで構成される発光デバイスに対して、柔軟な発光波長制御や、特定の波長域での発光を可能とする波長選択性に優れる。特に、Ce<sup>3+</sup>を発光中心とした蛍光材料は、ワイドな発光波長領域を有するマルチエミッション蛍光体として注目されている。協働先の名大・小林らのグループは、Ca<sub>5.7</sub>Y<sub>1.3</sub>Si<sub>7</sub>O<sub>16.7</sub>N<sub>3.3</sub> 母構造に対して、Ce原子を20 mol%ドープしたCe: Ca<sub>5.7</sub>Y<sub>1.3</sub>Si<sub>7</sub>O<sub>16.7</sub>N<sub>3.3</sub>が、紫色から橙色までの幅広い4つの発光波長を有する優れたマルチエミッション蛍光体であることを示している[1]。協働先のグループでは、発光中心となる2つのCe<sup>3+</sup>サイトでスピン-軌道相互作用が生じ、2+2=4波長の発光スペクトルが現れると示唆している[1]。しかしながら、前段の2つのCe発光中心サイトが形成される機構は未解明である。そこで、第一原理計算によるアプローチから、Ce:Ca<sub>5.7</sub>Y<sub>1.3</sub>Si<sub>7</sub>O<sub>16.7</sub>N<sub>3.3</sub>の蛍光機構の解析を試みた。本研究では、母構造におけるCe置換サイトの多様性によって、蛍光における4f-5d電子遷移のエネルギー幅が異なることで、マルチエミッションが起こっているのではないかという、初期仮説を立てた。そこで、Ce置換パターン構造に対するPDOS解析から、非等価置換パターン間でバンドギャップに差が生じるかを解析した。本解析では、蛍光におけるCeの4f-5dの電子遷移幅を、基底状態における4f-5dのバンドギャップとして近似的に解析する方策をとった。

Ce置換前の母構造Ca<sub>5.7</sub>Y<sub>1.3</sub>Si<sub>7</sub>O<sub>16.7</sub>N<sub>3.3</sub>は、ユニットセルで表現できるCa<sub>9</sub>Y<sub>5</sub>Si<sub>14</sub>O<sub>31</sub>N<sub>9</sub>として結晶構造をモデル化した。母構造には、Y/Ca, O/N混晶サイトが存在し、複数の置換パターン構造が考えられる。そこで、結晶学的に非等価な置換パターン構造を生成するSHRYパッケージ[2]を使用することで、全置換パターン構造を生成した。各置換パターン構造に対する第一原理構造最適化計算を適用することで、安定置換パターン構造の予測を行った。最安定予測パターン構造には、5つのCe置換パターンが考えられる。Y/Ca, O/N混晶サイトの無秩序性を考慮しない場合は、これらの5サイトは図1に示すように、結晶学的に2種類の非等価なサイト(M1, M2)に分類される。Y/Ca, O/Nサイトの無秩序性を考慮すると、M2サイトはさらに図1のM2-1, M2-2, M2-3, M2-4の結晶学的に非等価なサイトに分類される。

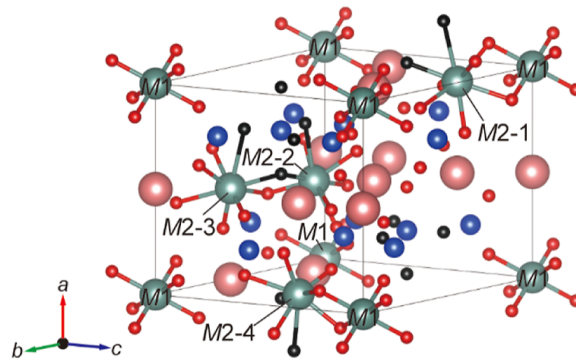


図1  $\text{Ca}_{5.7}\text{Y}_{1.3}\text{Si}_7\text{O}_{16.7}\text{N}_{3.3}$  における 5 つの Ce 置換候補サイト(M1, M2-1, M2-2, M2-3, M2-4)。  
赤色、黒色、青色、ピンク色、灰色はそれぞれ O, N, Si, Ca, Y 原子を示す。文献[1]から転載。

Ce 置換パターン構造に対する第一原理構造最適化計算から、M1 サイトへの Ce 置換体は安定に存在し得ないことを示した。この計算結果の妥当性を確かめるため、合成した 20 mol%置換の Ce:  $\text{Ca}_{5.7}\text{Y}_{1.3}\text{Si}_7\text{O}_{16.7}\text{N}_{3.3}$  に対するリードベルト解析を行ったところ、計算結果と符号する結果が得られた。残りの 4 つの M2 サイトの Ce 置換パターン構造に対する PDOS 解析より、Ce-d/f 軌道が形成するバンドギャップの大きさで{M2-1, M2-4}, {M2-2, M2-3}の 2 つに分類されることを示した。このうち{M2-1, M2-4}の方が、長い Ce-O, Ce-N の平均結合距離を示した。これは、O/N 原子と結合する Y/Ca 原子の各配位数が{M2-1, M2-4}と異なり、配位原子の電気陰性度の違いによって、O/N 原子の電子密度に影響を与えたためと考えられる。Ce-O, Ce-N の結合距離がより長いということは結合がより弱く、Ce と O/N 間の結晶場分裂エネルギーがより小さいと考えられる。そのため、{M2-1, M2-4}は Ce-5d 由来の CBM に対して、より浅い位置に Ce-4f 由来の VBM を形成し、バンドギャップが{M2-2, M2-3}よりも小さくなると考えられる。これらから、Ce: $\text{Ca}_{5.7}\text{Y}_{1.3}\text{Si}_7\text{O}_{16.7}\text{N}_{3.3}$  におけるスピン-軌道相互作用を除くマルチエミッションの起源は、 $\text{Y}^{3+}/\text{Ca}^{2+}$ カチオン配置の無秩序性に起因すると結論付けられる。

#### 引用文献

[1] T. Yasunaga *et al.*, "Multiemission of  $\text{Ce}^{3+}$  from a Single Crystallographic Site Induced by Disorder of Ions", *Inorg. Chem.* 63(2) 1288-1295 (2024).

[2] G. Prayogo *et al.*, "Shry: Application of Canonical Augmentation to the Atomic Substitution Problem", *J. Chem. Inf. Model.* 62(12) 2909–2915 (2022).

#### 関連発表論文

1) T. Yasunaga *et al.*, "Multiemission of  $\text{Ce}^{3+}$  from a Single Crystallographic Site Induced by Disorder of Ions", *Inorg. Chem.* 63(2) 1288-1295 (2024).

#### 学会発表

1) "第一原理計算による Cobalt Carbonate Hydroxide (CCH)擬キャパシタ材料の電気化学反応解析", 奥村健司, 東間崇洋, 前園涼, 本郷研太, 日本セラミックス協会第 36 回秋季シンポジウム, 京都工芸繊維大学松ヶ崎キャンパス, 2023/09/06-08 (口頭)

#### 関連取得研究費

1) JAIST 次世代特別研究員



# Computational Discovery of High Thermal Conductive Polymer Crystals Using Physics-Informed Screening and Phonon Calculation

**Dahule Rohit Sanjay**

Maezono Group

Machine: Kagayaki

## Abstract:

High thermal conductive (HTC) polymers are crucial for industrial applications [1], but their exploration is challenging due to the multi-degree of freedom during synthesis. This study focuses on polymer crystals with high thermal conductivity, which are considered the upper limits of actual polymers. A data-driven method was used to computationally discover HTC polymer crystals, combining physics-informed screening with first-principles phonon calculations [2]. High-throughput screening of 1,073 polymer crystal structures from the polymer genome datasets was performed [3]. The structures were optimized using density functional theory (DFT) simulation with the Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [4]. The Phono3py package [5] was used to set up calculations and compile *ab initio* results to assess lattice thermal conductivity (LTC), phonon lifetimes, and modal heat capacities of polymer crystals. The approach resulted in Polymethylenimine (PMI), Poly (methylene oxide) (PMO), and Polyamide (PA) polymer crystals with LTC values of 22, 95, and 65 W/m·K, respectively, at 300K. The proposed data-driven framework integrated with *ab initio* simulation should facilitate theoretical and experimental design of high thermal conductivity polymer crystals.

## References:

- [1] Y. Guo, Y. Zhou, and Y. Xu, *Polymer* **233**, 124168 (2021).
- [2] K. Utimula, T. Ichibha, R. Maezono, & K. Hongo, *Chem. Mater.* **31(13)**, 4649-4656 (2019).
- [3] C. Kim, A. Chandrasekaran, T. D. Huan, D. Das, and R. Ramprasad, *J. Phys. Chem. C* **122**, 17575–17585 (2018).
- [4] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
- [5] A. Togo, L. Chaput, and I. Tanaka, *Phys. Rev. B* **91**, 094306 (2015).

## Published papers:

- 1) [R. Dahule](#), K. Oqumhula, R. Maezono, and K. Hongo, Physics-informed data-driven discovery of high thermal conductive polymer crystals (Under preparation)

# Ab-initio Study of Direct Methane Conversion to Methanol on Multiple Catalyst Types

2024年 2月 28日  
School of Information Science, Lab. Maezono Group,  
SUKANLI, Reza Pamungkas Putra  
Machine: Kagayaki System

## Abstract

I utilize resources from JAIST's educational facility to conduct ab-initio analysis, specifically employing density functional theory. I uses Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)[1] and Quantum Espresso (QE)[2] for the examination of periodic systems, such as graphene surfaces[3] or metal-organic frameworks (MOFs)[4] compound. My primary focus is on the study of catalytic reactions involved in the direct conversion of methane to methanol on various catalyst surfaces. The main goal of this research is to examine the reaction pathways and elucidate the phenomena occurring throughout the process. this involves identifying the ground state of each initial, intermediate, and final state of a reaction, as well as determining the transition state for steps that involve bond-breaking, bond-forming, or atom diffusion events. The time required for each ground state calculation can vary from a few hours to several days, contingent on the complexity of the systems under analysis. Moreover, locating the transition state may demand more time, as it requires increased computational resources. For reference, ground state calculations typically utilize 32 to 128 cores on the kagayaki server, whereas transition state calculations may require 512 to 1024 cores, depending on the system. Additionally, there are post-DFT calculations that include the analysis of the Density of States (DOS), band structure, Crystal Orbital Hamilton Population (COHP), and Bader charge analysis.

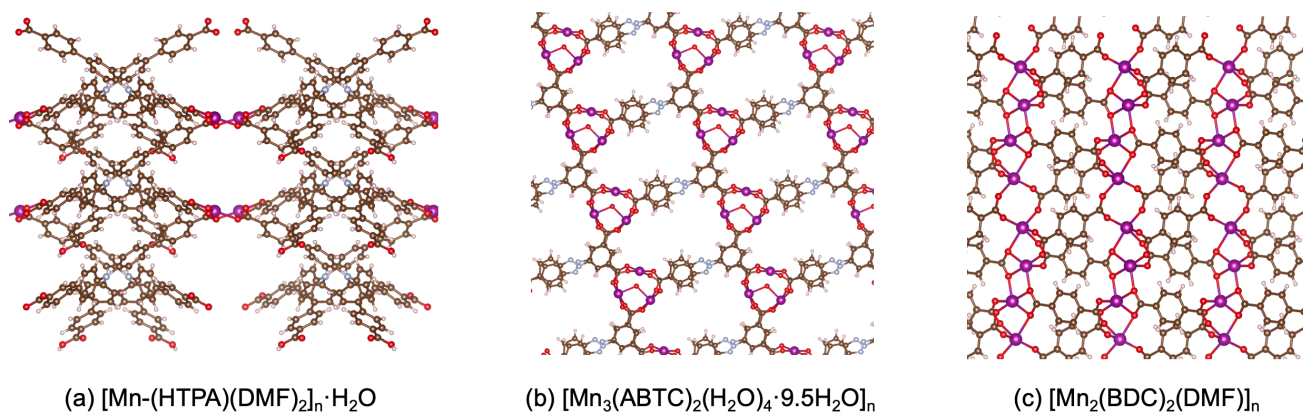


Figure 1: Crystal structure of MOFs systems.

## References

- [1] G. Kresse and J. Furthmüller, *Comput. Mater. Sci.* **6**, 15–50 (1996).
- [2] P. Giannozzi *et al.*, *J. Phys.: Condens.Matter.* **21**, 395502 (2009).
- [3] C. Yang *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 24264–24270 (2022).
- [4] H. Adamji *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **145**, 14365–14378 (2023).

# Diffusion Monte Carlo Study of High-Pressure Solid Hydrogen Phase

Putu Bhargo Abhimana Chrysnanda  
Maezono Group  
Machine:: Kagayaki

## Abstract

Hydrogen is the most abundant element in the universe which often resides under high pressure inside many celestial objects. The study of its phase under such pressure is important for our understanding in many branches of physics such as the physics of stars and planets. However, experimentally studying such a high-pressure regime faces many challenges due to the limitations of experimental apparatuses and consequently, computational methods have become vital in investigating such systems.

From the previous research, hydrogen is expected to transition into a metallic hydrogen (Cs-IV) phase at around 500 GPa. This phase is predicted to be the most stable up until around 2 TPa, at which some other phases such as R-3m structure are predicted to be more favorable than Cs-IV by Density Functional Theory (DFT) studies. In this study, we aim to construct an accurate phase diagram of hydrogen within the pressure range of 500 GPa to 2000 GPa. To construct the phase diagram, the stability of many candidate structures needs to be evaluated in terms of their dynamic enthalpies. These candidate structures are gathered from previous studies and additionally, from employing a crystal structure search based on the evolutionary algorithm implemented in USPEX code. All considered candidate structures are optimized using the DFT method, and the resulting structures are then evaluated using diffusion quantum Monte Carlo (DMC) method to obtain a more accurate static enthalpy. Finally, the dynamic enthalpy is obtained by including the zero-point energy of the structures, which will be evaluated using the harmonic approximation implemented in the Phonopy package.

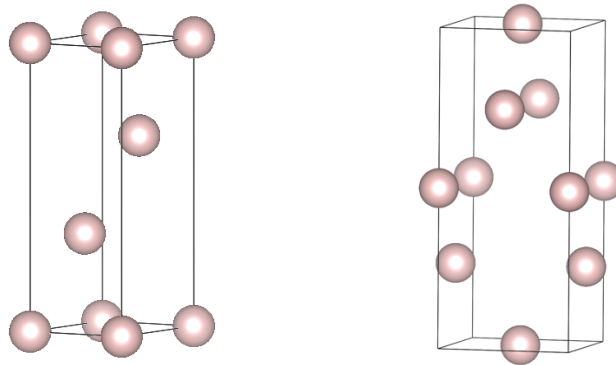


Figure 1: Example of the candidate structure of high-pressure hydrogen: the R-3m structure (left) and Cs-IV structure (right)

## 金属硫化物系電子化物におけるデータ駆動型超伝導体探索

所属・氏名 本郷研究室 Qi Huan

使用計算機: KAGAYAKI

### 概要

電子化物(エレクトライド)は、化合物中の電子が格子内に局在してアニオン(イオン結晶中の陰イオン)のように振る舞う化合物である。そのようなエレクトライド状態が錯体溶液中で発見されて以来、セラミックスや金属間化合物などの物質系でも発見された。その機能物性はエレクトライド状態の次元性に依存して変化するため、電極材料や誘電体材料、触媒など様々な産業応用が知られている[1]。最近、電子化物高圧で BCS 型超伝導の発現が報告され、新しいクラスの超伝導体として注目を集めている[2]。しかしながら、エレクトライド状態と超伝導状態の共存する化合物系の種類や機構はほとんど解明されていない。本研究は、データ駆動型構造探索手法と大規模第一原理計算を組み合わせた物質探索のワークフローを開発し、電子化物系における新規超伝導体を探索する。具体的には、金属硫化物系を対象として、圧力を変化させながら、(1) 当該物質系のエンタルピー最安定な結晶構造を遺伝的アルゴリズムを用いて探索し、(2) その熱力学的安定性を凸包解析によって検証するとともに、(3) 第一原理フォノン計算によって構造の動的安定性(虚数モード出現有無の確認)を検証する。こうして得られた候補物質系に対して、(4) 密度汎関数摂動論による電子格子結合定数を算定し、それをもとに、McMillan 公式により超伝導転移温度( $T_c$ )を推定し、高圧硫化物系電子化物における超伝導発現機構を解明する。各計算ステップにて利用するプログラムパッケージは、(1) USPEX[3,4]、(2) VASP[5]、(3) PHONOPY [6]、(4) Quantum Espresso [7,8]であり、これらは全て KAGAYAKI 上にインストール済みである。現在、 $\text{Li}_{10}\text{S}$  を対象として、異なる圧力 (10GPa、40GPa、70GPa、100GPa) で、ハイスループット計算を実施している。

### 参考文献

- [1] H. Hosono and M. Ktano, *Chem. Rev.* **121**, 3121 (2021).
- [2] Z. Liu, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 157002 (2021).
- [3] C.W. Glass, *et al.*, *Comput. Phys. Commun.* **175**, 713 (2006).
- [4] A.O. Lyakhov, *et al.*, *Comput. Phys. Commun.* **184**, 1172 (2013).
- [5] J. Hafner, *Comput. Phys. Commun.* **177**, 6 (2007).
- [6] T. Togo and I. Tanaka, *Scr. Mater.* **108**, 1 (2015).
- [7] P. Giannozzi, *et al.*, *J.Phys.: Condens.Matter* **21**, 395502 (2009).
- [8] P. Giannozzi, *et al.*, *J.Phys.: Condens.Matter* **29**, 465901 (2017).

# First-principles study of chalcogenide perovskite for solar cell applications.

School of Information Science, Hongo laboratory,

Hasan Sayed Sahriar (2311010)

Machine: KAGAYAKI

## Abstract

Electronic, thermal, and optical properties of  $AB_2S_3$  ( $A = \text{Ca, Ba, Sr}$  and  $B = \text{Zr, Hf}$ ) have been computed within the framework of first-principles density functional theory (DFT) in order to investigate their solar cell applications. All our DFT calculations were carried out using VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) installed on KAGAYAKI, where the exchange-correlation functional was set to be the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) implementation of the generalized gradient approximation (GGA) with a cutoff energy of 250 eV for the planewave expansion and a  $7 \times 7 \times 5$  k-mesh for the Brillouin zone sampling. The GGA-PBE calculation was applied to evaluate the band structure of  $\text{CaZrS}_3$  (see Figure 1 (left) for its crystal structure and (right) for resultant band structure). In addition, its elastic constants and phonon dispersion were respectively evaluated by using the VASP and Phonopy packages to verify its static and dynamic structural stabilities, respectively. Our final goal is to investigate the frequency-dependent optical properties such as absorption coefficient and loss function that are real and imaginary parts of frequency-dependent dielectric function. The dielectric function can be evaluated based on the density functional perturbation theory (DFPT) with respect to applied electric fields. Our DFPT calculations were done using VASP for photon energies up to 50 eV with electric field polarization vectors along the [100] direction.

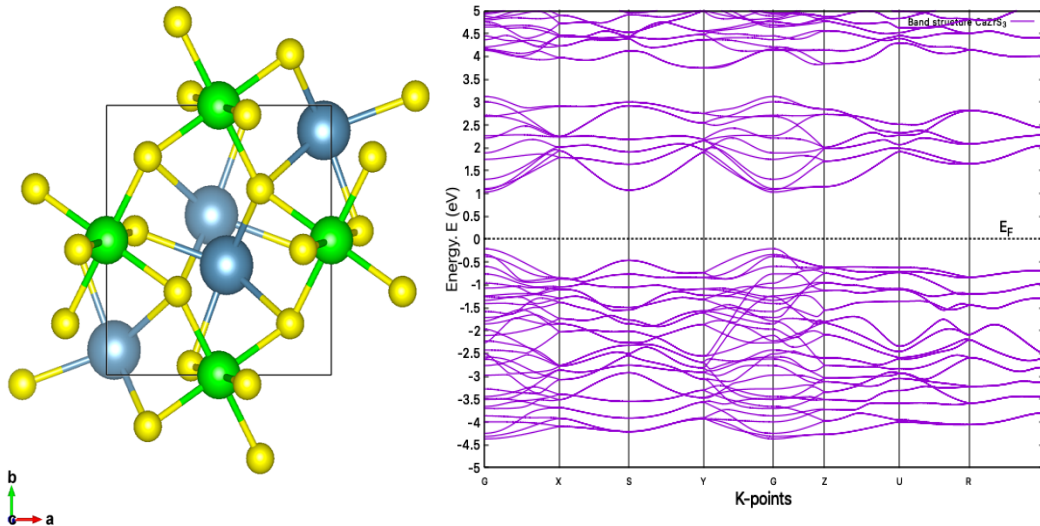


Fig.1 Crystal structure of  $\text{CaZrS}_3$  (left) and its electronic band structure (right). Green-, yellow-, and gray-colored balls in the structure represent Zr, Ca and S, respectively. The band gap value is 1.237 eV and the  $\text{CaZrS}_3$  was found to possess the direct gap.

# 等モル量ハイエントロピー合金の結晶構造決定因子探求

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: KAGAYAKI

## 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、構造材料だけでなく、触媒材料としても期待されており、研究が広く行われている。本共同研究では、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、L1<sub>2</sub>、D0<sub>22</sub> 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)

従来の実験からのアプローチでは、FCC または BCC 構造単相およびそれらの構造が混在する HEA について多くの研究報告があるが、HCP の HEA はわずかに報告されているのみである。本年度は、半経験的手法と第一原理計算を組み合わせる HCP 構造をもつ HEA を見出すことを目的として、大規模スクリーニングを実施した。予備的な計算結果であるが、単元素 HCP の VEC に近い領域に HCP の HEA が発現する傾向がみられた。これらの情報は HEA 研究をさらに広げる契機になると期待され、現在、投稿論文の作成段階である。

これまでの共同研究を展開、拡張させるために令和 7 年度 JSPS 二国間交流事業 (共同研究) に応募予定である。また、平成 11 年に締結した JAIST-韓国科学技術研究院間の学術交流協定を発展させるために、韓国側では海外優秀研究機関協力ハブ構築事業に応募した。

## 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”, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods*, **3** (2023) 2153632.

## 学会発表

1. Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, and Kenta Hongo (Invited), “Order-disorder Coexistence Phases in Equiatomic 3d-transition-metal Quaternary Alloys”, 7th International Conference on Nanoscience and Nanotechnology – ICONN 2023 (Virtual Conference) (SRM IST, Chennai, India (on-line), March 27-29, 2023.)
2. Hiroshi Mizuseki, “Order-disorder Competition in Equiatomic 3d-transition-metal Quaternary Alloys: A First-Principles Study”, Seminar in Department of Nuclear Engineering, Seoul National University, (Department of Nuclear Engineering, Seoul National University, November 24, 2023.)
3. Hiroshi Mizuseki, “Atomistic Configurations in Alloying Materials: Group-III Nitrides and High-entropy Alloys”, ACCMS-Global Research Center webinar#22, (ACCMS-GRC webinar#22, on-line, November 28, 2023.)

GPU における疎行列密ベクトル積(SpMV)の高速化のための疎行列格納形式に関する研究

所属・氏名

井口研究室 村上舜

使用計算機 Kagayaki

## 概要

近年、設計の複雑化や大規模化にともない、流体解析や構造力学といった物理現象のシミュレーションの重要性が増している。その自然現象を表す偏微分方程式の厳密解を求めることが困難であるため、大規模な連立一次方程式の数値計算に帰着させ、コンピュータ上で数値的に求めることが一般的である。このとき生成される係数行列はその行列サイズが非常に大きいとその要素の値の多くが0である疎行列となる。そのため、多くの科学技術計算において、疎行列を係数行列にもつ連立一次方程式を高速に求解することが求められており、その求解法としては反復解法が用いられることが多い。実際にスーパーコンピュータの処理性能のランキングを決める TOP500 に HPCG と呼ばれる、疎行列を係数行列として持つ大規模連立一次方程式を CG 法と呼ばれる反復解法で求解するベンチマークが用いられていることから、その重要性が明らかである。

本研究ではその反復解法における主要な計算である疎行列密ベクトル積(SpMV)を GPU 上で高速に計算を行うため、係数行列を格納するための疎行列格納形式のメモリアクセスに着目し、SpMV 計算時のメモリ帯域を効率よく利用することによって、SpMV 計算の高速化を図った。結果として NVIDIA A100 上で SpMV 計算を実行した場合、既存の CSR 形式を用いた SpMV 計算と比較して 19.6%の高速化を達成した。

本研究を進めるうえで Kagayaki の GPU ノードを用いることで、格納形式変換に必要な最適なパラメータの探索を並列して進めることができた。また、CPU 上で逐次的に実装したプログラムを並列化するうえで、一度 OpenMP を用いた CPU での並列プログラムを Kagayaki の 128core の多コア CPU ノードで行うことによって、CUDA を用いて GPU で直接実装するよりも、効率的にデバッグと並列化効率を試すことができた。

## 関連発表論文

1. 村上 舜, 米田 一徳, 岩村 尚, 渡邊 正宏, 井口 寧, 「GPU における疎行列密ベクトル積の高速化のための非ゼロ要素位置辞書圧縮を適用した疎行列格納形式の提案」, 情

報処理学会 第 190 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, Aug. 2023

2. 村上 舜, 米田 一徳, 岩村 尚, 渡邊 正宏, 井口 寧, 「疎行列密ベクトル積の高速化のための非ゼロ要素位置辞書圧縮を適用した疎行列格納形式の GPU における形式変換の評価」, 情報処理学会 コンピューターシステム研究会, Dec. 2023



# Large Language Model-based cybersecurity research

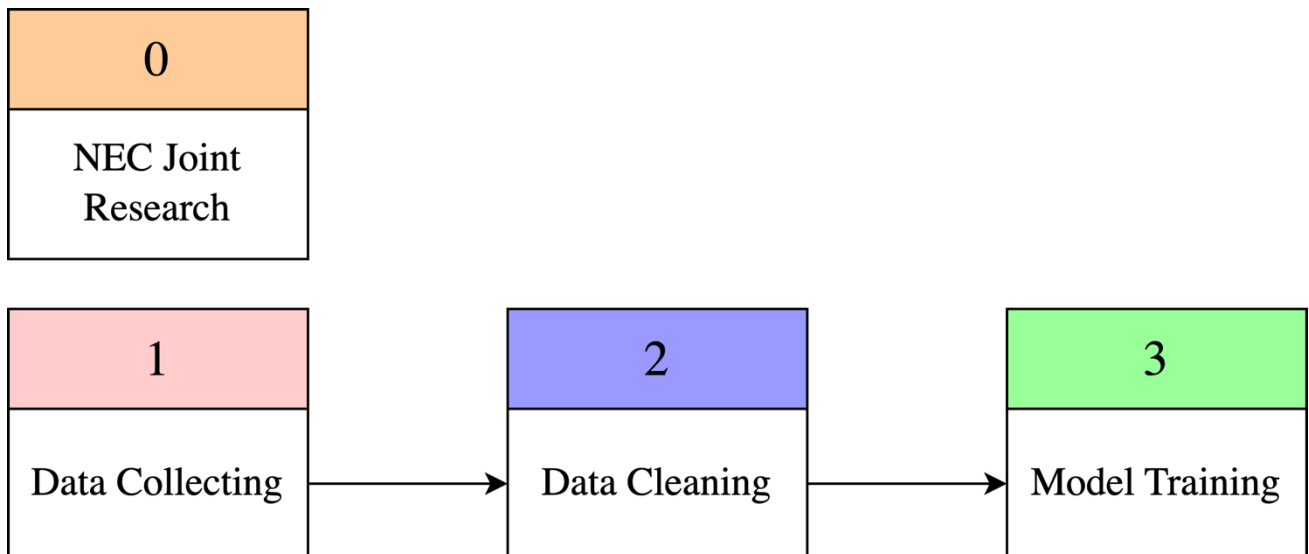
Information of Science,  
Beuran Lab,  
MAI, Trong Khang  
Machine:: HPC System,  
KAGAYAKI (kagayaki)  
Large Memory PC Cluster -  
superdome-(Impcc)

## Abstract

The cybersecurity scenario becomes complex because of the increase in the number of networked components and features. To cope with the changes in the cybersecurity domain, information sharing is one of the most important aspects of cybersecurity research.

Information sharing mostly is done via text reports and documents. While Large Language Models (LLM) excel in research related to text and language. In my research, I want to use LLM to enhance cybersecurity information sharing.

The current workflow I am working on is demonstrated in the Figure.



0. NEC Joint Research – I participate in joint research with NEC in cybersecurity domain. I use Kagayaki to work with text analysis on a small scale
1. To train LLM, we need a very large amount of text data. I am collecting them from the internet. I am using 3 computing nodes to download the big data
2. To clean the data, I need computing node with large memory. This stage will be done in the near future
3. To train the model 7 billion parameters, I need at least 4 GPU A100. At the current time, the

capacity of Kagayaki is not enough (due to long queueing time). I may have to rent an external system

Published papers:

- 1) SCIS 2024 Attack Path Extraction via Semi-Automatic Analysis of Cyber Threat Reports (NEC joint research)

Obtained budget (If you got.)

- 1) NEC budget from the joint research. This budget is only for research related to the Joint Research. It does not include my thesis.

## Study on blind estimation of room acoustic and physical parameters

所属・氏名 Lijun, Wang@Okadalab

使用計算機: Kagayaki

### 概要

Room acoustic and physical parameters (RAPs and RPPs) are essential metrics for parameterizing the room acoustic characteristics (RAC) of a sound field around the listener's local environment, offering comprehensive indications for various applications.

RAPs and a few RPPs, such as reverberation time and room volume, can be derived from the measured room impulse response (RIR). Nevertheless, measuring RIR is challenging in regularly occupied enclosures and limited in grasping the dynamics of the local RAC around the listener. Moreover, some RPPs, such as sound source distance and instantaneous occupancy level, are listener-dependent. The simultaneous blind estimation of RAPs and RPPs to dynamically parameterize the RAC is a challenging issue that needs to be addressed.

Current methods for RAPs and RPPs estimation either fall short of covering broad real-world acoustic environments in the context of real background noise or lack a universal framework for blind estimation of RAPs and RPPs from noisy single-channel speech signals, particularly for sound source distance, direction-of-arrival (DOA) of sound source, and occupancy level. To fill these gaps, this paper proposes a universal blind estimation framework called BERP: the Blind Estimator of Room acoustic and physical Parameters. In BERP, we adopt the unified encoder structure to map the observed signals to the physic-meaningful room parameters in a simultaneous way. Furthermore, BERP incorporates a new stochastic RIR model, the Sparse Stochastic Impulse Response (SSIR), facilitating the simultaneous derivation of RAPs using the synthesized RIR by the SSIR parameters that blindly estimated from observed signals. This estimation framework allows for the universal estimation of RAPs and RPPs. The effectiveness of BERP was evaluated using a task-specific dataset compiled from publicly available datasets, showing significant outperformance over existing methods in both separate and joint estimation strategies, as evidenced by mean absolute error (MAE) and Pearson correlation coefficient metrics. Additionally, the results pertaining to SSIR demonstrated the efficacy of the proposed SSIR RIR model.

### 関連発表論文

- 1) Prepare to submit IEEE/ACM Transactions on Audio Speech and Language (TASLP)

### 関連取得研究費（もしあれば）

- 1) Research Project: オンライン知識獲得による音声対話システムの自律進化

### 3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバ利用研究

## Ziegler-Natta 触媒の非経験的構造決定に関する研究

先端科学技術研究科 谷池研究室・筑間 弘樹, DA SILVEIRA João Marcos, 和田 透, 藤原 彩, 谷池 俊明  
使用計算機: Impcc, KAGAYAKI

Ziegler-Natta 触媒 (ZN 触媒) は、ポリオレフィン生産の中核を担う触媒であり、その構造単位である一次粒子は、活性点前駆体である  $\text{TiCl}_4$  及び改質剤である内部ドナーによって終端された  $\text{MgCl}_2$  ナノプレートである。その構造の詳細情報は触媒機構解明の基礎となるが、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、特に ZN 触媒においてその構造の詳細は未解明である。当研究室では、遺伝的アルゴリズム (GA) と密度汎関数法 (DFT) を組み合わせることにより実験結果によらない ZN 触媒の正確な分子モデルの決定を試みている。実触媒サイズの系における構造決定においては、DFT 計算の計算コスト削減が大きな課題となる。本年度は、高次元ニューラルネットワークポテンシャル (HDNNP) の導入による計算コスト削減および内部ドナーの吸着を考慮した非経験的構造決定 (Fig. 1) に取り組んだ。共有計算サーバは、GA による内部ドナー吸着を含む ZN 触媒の非経験的構造決定および HDNNP 構築に活用された。DFT 計算には多大な計算量を要し、GA を行うためには効率的な並列計算が不可欠である。HDNNP によって実触媒スケールのサイズおよび  $\text{TiCl}_4$  被覆率を有する  $\text{TiCl}_4$  終端  $\text{MgCl}_2$  ナノプレート ( $50\text{MgCl}_2/9\text{TiCl}_4$ ) の構造決定を実現した。この成果は発表 1-3 で報告された。また、内部ドナーを考慮した非経験的構造決定では、GA による構造決定で得られた準安定構造から一次粒子構造の分布を評価した。本検討では、ドナーを含まない系では見られなかった特異的な  $\text{MgCl}_2$  ナノプレートの表面構造が得られ、内部ドナーが表面の再構成に大きく寄与している証拠を得た。これらは発表 4-8 で報告された。

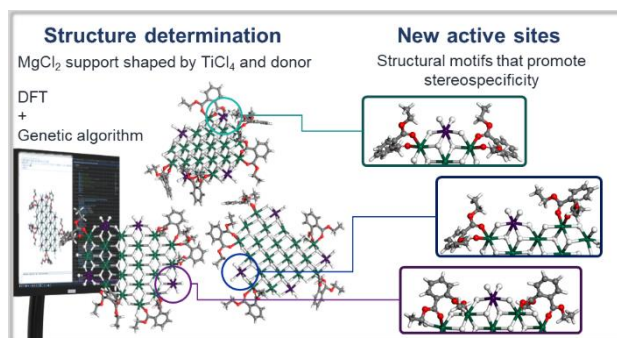


Fig. 1. 内部ドナー吸着を含めた非経験的構造決定の概要図

### 【関連発表・論文】

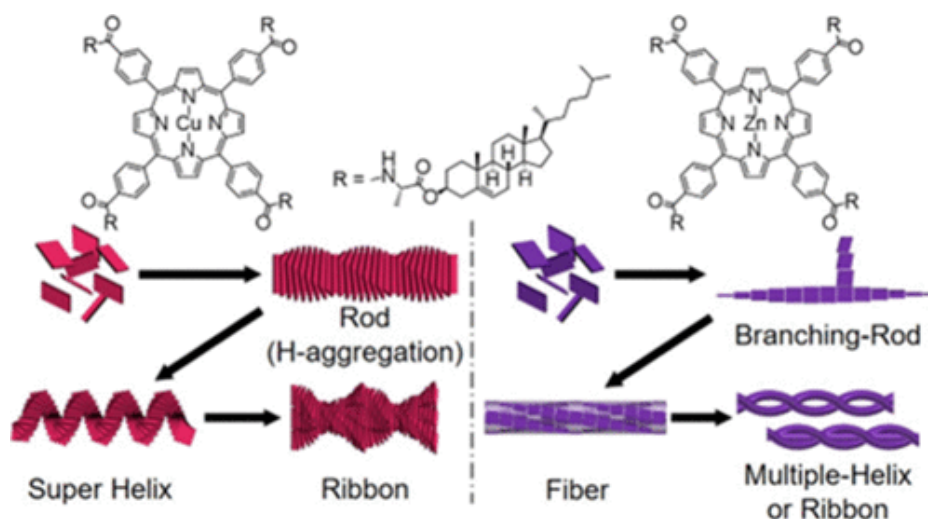
- 1) The Journal of Physical Chemistry C 2023, 127, 11683–11691.
- 2) First Combined Blue Sky - INCOREP Polyolefin Conference, Sorrento, Italy, Jun. 12-16, 2023, poster.
- 3) The 13<sup>th</sup> SPSJ International Polymer Conference (IPC2023), Sapporo, Japan, Jul. 18-21, 2023, oral.
- 4) ACS Catalysis 2024, 14, 2300–2312.
- 5) Asian Polyolefin Workshop 2023, Nara, Nara, Japan, Dec. 10-14, 2023, poster. (Best APO2023 Poster Presentation award).
- 6) 第 53 回石油・石油化学討論会, 大阪, 2023 年 10 月 26-27 日, 一般口頭.
- 7) International Symposium on Materials Informatics 2023 -Multidisciplinary approach to olefin polymerization catalysis-, Nomi, Japan, Dec. 8, 2023, invited talk.
- 8) First Combined Blue Sky - INCOREP Polyolefin Conference, Sorrento, Italy, Jun. 12-16, 2023, poster.
- 9) First Combined Blue Sky - INCOREP Polyolefin Conference, Sorrento, Italy, Jun. 12-16, 2023, poster.

コレステリル基を有するポルフィリンの合成と超分子ポリマーの  
高速 AFM イメージングと全原子 MD シミュレーション

堀 諒雅、篠原 健一

使用ソフト Materials Studio

計算機 KAGAYAKI



We report the synthesis and microscopic investigations of two chiral helical porphyrin supramolecular polymers with different coordinating metals that are expected to be capable of serving as synthetic macromolecular motors driven by thermal fluctuations. Furthermore, based on their microscopic images, we propose a stepwise process for the formation of higher-order structures. These porphyrins formed completely different association states, and this was reflected in the marked differences in the shapes of the supramolecular polymers. The Cu-TChOAlaCPP supramolecular polymers formed H-aggregate rods in diisopropyl ether, then grew into superhelices and then into ribbons. On the other hand, Zn-TChOAlaCPP supramolecular polymers formed aggregates based on van der Waals interactions in diethyl ether, then grew into fibers and then grew into multiple-helices and ribbons. In addition, we imaged the interaction between long and short chains of the Cu-TChOAlaCPP supramolecular polymer by fast-scanning atomic force microscopy, and we indicated the availability as a macromolecular motor driven by thermal fluctuations.

Ref.) Ryoga Hori, Koichi Higashimine, Osamu Notoya, Ken-ichi Shinohara, “Synthesis and Direct Observation of Chiral Supramolecular Polymer of Porphyrin Having Cholesteryl Groups”, *Langmuir* 40, 10, 5535–5544 (2024).

# 分子シミュレーションを活用した糖鎖-タンパク質相互作用のダイナミクスの解析

マテリアルサイエンス・山口拓実

使用計算機: KAGAYAKI,

Large Memory PC Cluster

## 概要

私たちは、糖鎖の構造-機能相関の解明に取り組んでいる。糖鎖の機能を理解するうえで計算科学手法は有用な情報をもたらす。糖鎖の生体機能は多くの場合、レクチン（糖鎖を認識するタンパク質の総称）との相互作用を通じて発揮される。レクチンは、溶液中で多様なコンフォメーションをとって揺らいでいる糖鎖を適切に識別しており、糖鎖の立体構造の揺らぎを含めた動態としての特徴付けが重要である。そこで分子動力学（MD）シミュレーションを通して、糖鎖の動的な3次元構造の描像と、タンパク質との相互作用メカニズムの解明に取り組んだ。

MD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。網羅的な構造サンプリングを行うために、溶液中の糖鎖のシミュレーションにはレプリカ交換 MD 法を用いた。また、統計的な解析は、PC Cluster 上で R を使用して実施した。

細胞内のタンパク質の品質管理に関わる高マンノース型糖鎖を対象に、MD シミュレーションを行なった。解析の結果、特定のマンノース残基の有無によって生じる分子内水素結合の組み換えが、高マンノース型糖鎖の動的挙動の違いの主要な原因であることが示唆された。さらに、不要タンパク質の分解に関わる糖鎖とレクチンとの相互作用を解析し、糖鎖-タンパク質複合体の揺らぎを明らかにすることができた。また、グルクロン酸転移酵素による糖転移反応をモデルとして、動的な糖鎖と酵素の相互作用の解析を試みた。分子シミュレーションにより得られた糖鎖の立体構造アンサンブルと、データベースに登録されている酵素の結晶構造情報を利用して複合体構造をモデリングし、糖鎖-酵素間の立体障害を評価した。その結果、糖鎖のダイナミクスを考慮することで、グルクロン酸転移酵素の反応性の違いを見積ることに成功した。このように、糖鎖の立体構造ダイナミクスの違いは、細胞内の酵素やレクチンとの相互作用の制御に密接に関与していると考えられる。糖鎖は医療のターゲットとしても注目されており、病気原因の解明や治療等へ応用するためにも、糖鎖-タンパク質相互作用の理解は役立つものと言える。

## 関連発表

- 1) 山口拓実, 谷中冨子, 加藤晃一, “分子シミュレーションによる糖鎖の3次元構造の動態予測,” *タンパク質の構造解析手法と In silico スクリーニングへの応用事例*, 技術情報協会, pp.237-245, 2023.
- 2) 張悦, 山口拓実, “分子シミュレーションとクラスター分析を用いた高マンノース型糖鎖の動的立体構造解析,” *第42回日本糖質学会年会*, 鳥取, 2023年9月.
- 3) Y. Zhang, T. Yamaguchi, “Characterization of dynamic conformation of high mannose-type oligosaccharides based on molecular simulation and data clustering,” *第61回日本生物物理学会年会*, 名古屋, 2023年11月.
- 4) V. Aggarwal, A. Srivastava, T. Yamaguchi “Dynamics analysis of the interaction between OS-9 lectin and glycans through molecular simulation studies,” *日本化学会 第104春季年会*, 船橋, 2024年3月.
- 5) 関 健仁, 山口拓実, 矢木宏和, 加藤晃一, “糖鎖の動的立体構造アンサンブルと糖転移酵素の相互作用評価法の開発,” *日本化学会 第104春季年会*, 船橋, 2024年3月.

## 熱電材料の電子・フォノン輸送に関する研究

所属・氏名 マテリアルサイエンス系・宮田全展

使用計算機: KAGAYAKI

### 概要

熱電変換は電気エネルギーと熱エネルギーを直接相互に変換できる物理現象であり、ペルチェ効果を利用した精密温度制御や、ゼーベック効果を利用した CO<sub>2</sub> フリーな発電の要素技術として、注目を集めている。本研究では実験と理論計算を協奏的に駆逐することで新規熱電材料の創製および性能向上へ向けた熱電物性の解明の研究を行った。特に Ag-P 化物熱電材料、硫化物熱電材料、Mg-Si 熱電材料、最も応用されている Te 系熱電材料の電子・フォノン物性について以下の研究成果・業績を得た。本研究の第一原理電子・フォノン計算は全て本学の大規模計算機 KAGAYAKI を用いて行われた。

1. Ag-P 化物複合材料において低い格子熱伝導率と高い出力因子を両立、室温で比較的高い熱電性能を示す新規材料の創製に成功し、メカニズムの実験と理論の両面から明らかにした。(論文執筆中) 本研究に関連した研究成果を発表した指導学生が、2023 年度の日本熱電学会にてポスター賞を受賞<sup>1)</sup>。
2. リン化物熱電材料、硫化物熱電材料の実験・理論計算の成果が評価され、2023 年度の日本熱電学会にて、日本の熱電変換の分野に大きな貢献をした若手研究者に贈られる進歩賞<sup>2)</sup>にノミネートされた。
3. 地元企業と県の研究機関との共同研究により、Mg-Si 熱電材料およびモジュールについて第一原理計算より設計指針の提案、メカニズムの解明に貢献した。
4. Ag-P 化合物の示すフォノンの非調和性について、4 次の非調和項まで考慮した第一原理格子動力学計算により、メカニズムの詳細を理論的に明らかにした。<sup>3)</sup>
5. 東京大学物性研究所との共同研究により、第一原理計算ソフトウェアパッケージ OpenMX と電子輸送計算コード BoltzTraP2 を繋ぐインターフェースプログラムの開発に成功し<sup>4)</sup>、OpenMX の ver4.0 にて公開準備中。
6. 企業との共同研究により、実験と計算を協奏させた高性能熱電材料の開発の研究に取り組み、メカニズムの解明に貢献した。

\*3, 6 についてはコンプライアンスの関係から、詳細について記載は差し控える。

### 関連発表論文

- 1) 多相からなる Ag<sub>3</sub>SnP<sub>7</sub> 焼結体の熱電物性の組成依存性, 中村 太一, 宮田 全展, 竹田 大樹, 宗本 隆志, 的場 彰成, 豊田 丈紫, 小矢野 幹夫, 第 20 回 日本熱電学会学術講演会. <日本熱電学会 優秀ポスター賞授賞>
- 2) 実験と第一原理計算による新奇硫化物・リン化物熱電材料のマテリアルデザイン, 宮田 全展, 第 20 回 日本熱電学会学術講演会. <日本熱電学会 進歩賞受賞>
- 3) “Anharmonic and glass-like phonon transport in the Tetrahedrite-manner Ag<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>Sn<sub>4</sub>P<sub>12</sub>”, Masanobu Miyata, and Mikio Koyano, Computational Materials Science 227, 112258 (2023). DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112258.
- 4) OpenMX と BoltzTraP2 を繋ぐインターフェースの開発と電子輸送計算, 宮田 全展, 杉本 昂優, 小矢野 幹夫, 尾崎 泰助, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会



## 「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

安東秀

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、「電気伝導、ジュール熱発生、熱拡散、相変化、光伝搬」の物理現象を含む相変化光スイッチシミュレーションシステムを開発した。これまでは、試作デバイスの構造を基に、ITO ヒーター層の上に相変化材料である GST 膜を乗せたモデル構造のシミュレーションを行ってきた。より最適なデバイス構造の探索のため、ITO 層の下に GST 膜を配置するモデル構造のシミュレーションを行った。当初、GST 膜直下の Si への熱の逃げが大きく、従来モデルと大きな違いが現れると予想したが、実際の計算結果では両モデルで大きな違いは見られず、GST の結晶化は従来モデルより少し速やかに進み、GST のアモルファス化は従来モデルより再結晶化が少し起こりやすいことが分かった。

#### ○低損失な相変化材料の探索

MnTe は変位型相変態を示す磁性半導体であり、光スイッチで利用される波長領域 ( $1.5\mu\text{m}$ ) で光吸収が非常に小さく、また高速に相変態が起こることが知られているため、相変化光スイッチの材料として有望である。MnTe の2つの結晶相である  $\alpha$  型と  $\beta$  型についての光学誘電率の第一原理計算を行った。計算によって、波長  $1.5\mu\text{m}$  での光吸収が極めて小さく、 $\alpha$ - $\beta$  相変態によって屈折率の実部が大きく変化することが確認できた。なお、 $\beta$  型の屈折率の計算結果は測定データとよく一致したので、計算は妥当であるといえる。 $\alpha$ - $\beta$  相変態の性質を理解するため、遷移過程のエネルギー計算を行った。2つの結晶相のユニットセル内の原子位置を単純に線形補間し、遷移途中のエネルギーを計算した結果、 $\alpha$  型のユニットセル体積における  $\beta \rightarrow \alpha$  遷移過程には  $0.2\text{eV}$  程度のエネルギー障壁があることが分かった。ただし、この単純な線形補間法では最適なパスを通った遷移ではない可能性があるため、今後は Nudged Elastic Band (NEB) 法を用いた遷移過程計算を進める予定である。なお、この第一原理計算に関する研究は、JAIST ナノマテリアル・デバイス研究領域の水谷教授及び安東秀准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, “Simulation Analysis of Optical Gate Switch Operation Using a Chalcogenide Phase-change Material”, International Symposium on Imaging, Sensing, and Optical Memory 2023 (ISOM' 23), Takamatsu, Kagawa, Japan, November 19-22, 2023. Tu-F-52 (2023. 11. 21).

<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

## 【序論】

脂質二重層中のリン脂質分子の二層間の移動（フリップフロップ）は、親水性の頭部基が疎水性の炭化水素領域を通過しなければならないため、脂質のみの人工膜ではほとんど起こらない現象である。脂質スクランブリングは様々な細胞機能の発現・維持に関与しているものの、その構造的特徴は未だ明らかにされていない。

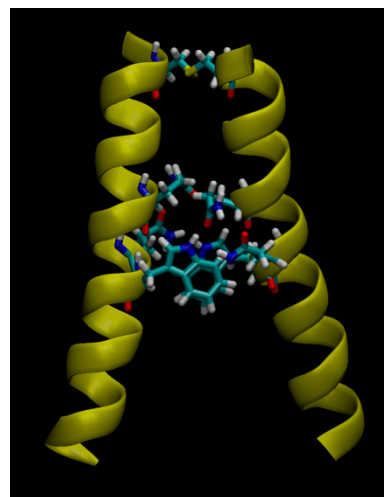
我々は時分割中性子小角散乱法を用いて、Leu と Ala の繰り返し配列からなるモデル膜貫通ペプチドが、POPC のフリップフロップを促進しないものの、配列中央の Leu 残基を Glu 残基に置換するとフリップフロップを促進することを示してきた。この配列中央の Glu 残基への置換は、置換する残基の数や位置によってスクランブリング活性は変化することが知られている。また、ペプチドをジスルフィド結合で二量体化することで、よりスクランブリング活性が上昇することが知られているが、活性上昇に関与する膜内構造は明らかとされていない。

そこで本研究では、ペプチド二量体の中央に Glu 残基を複数導入した膜貫通ペプチドの分子動力学（MD）シミュレーションを実行し、ペプチドの膜内における特徴的な構造の振る舞い（分子配向や Glu 残基の膜内位置、膜内構造の安定性）を詳細に解析し、スクランブラーゼ活性に与える影響について考察する。本報告ではジスルフィド結合の位置を変えた Glu を 2 残基持つペプチドを 4 種類、Glu を 3 残基持つペプチドを 1 種類モデリングし、これら膜貫通ペプチドを POPC 脂質膜に導入した結果について報告する。

## 【方法・結果】

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。解析は、膜厚方向に対する原子分布や、ペプチド間の結合特性も評価した。また、各モデル膜貫通ペプチドの POPC 膜の膜厚方向に対する配向や、ペプチド二量体間の角度の特性評価した。MD・計算には GROACS2018 を用いた。

右図に実験でスクランブラーゼ活性が強く現れたモデルペプチドを POPC 膜に挿入した系におけるスナップショット構造を示す。ペプチドは MD シミュレーションの間、2 量体構造を保持し続け、ペプチドの配向角度やペプチド間の角度も制限されていた。また、図に示されているように、ペプチド間の Glu や Trp 残基間で得意的な相互作用が生じていることが示された。このような特性は他の活性が強いモデルペプチドでも観測されたことから、ペプチドの二量体形成の保持がスクランブラーゼ活性における重要因子であることが示唆された。



関連発表論文（査読あり）

- 1) Takashi Kamei, Jun Miyazaki, Ryoga Hori, Hiroaki Saito, Tatsuo Takahashi, Ken-ichi Shinohara, Masakazu Miura, Hirokazu Suzuki, "Spectral and HPLC Analyses of Synthesized Butin and Butein", Chem. Pharm. Bull., in press.

- 2) Honami Echizen, Kenjiro Hanaoka, Kazuhito Shimamoto, Ryota Hibi, Sachiko Toma-Fukai, Hisashi Ohno, Eita Sasaki, Toru Komatsu, Tasuku Ueno, Yukihiro Tsuchiya, Yasuo Watanabe, Takao Otsuka, Hiroaki Saito, Satoru Nagatoishi, Kouhei Tsumoto, Hirotatsu Kojima, Takayoshi Okabe, Toshiyuki Shimizu, & Yasuteru Urano, "Discovery of a cystathionine  $\gamma$ -lyase (CSE) selective inhibitor targeting active-site pyridoxal 5'-phosphate (PLP) via Schiff base formation" *Scientific Reports* 13, 16456 (2023)
- 3) Kengo Hayashi, Nobuki Kato, Khurram Bashir, Haruna Nomoto, Misuzu Nakayama, Andrea Chini, Satoshi Takahashi, Hiroaki Saito, Raku Watanabe, Yousuke Takaoka, Maho Tanaka, Atsushi J. Nagano, Motoaki Seki, Roberto Solano, Minoru Ueda, "Subtype-selective agonists of plant hormone co-receptor COI1-JAZs identified from the stereoisomers of coronatine", *COMMUNICATIONS BIOLOGY* (2023)6:320
- 4) 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.
- 5) 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.
- 6) 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 SlCOI1-SlJAZ", *Scientific Reports* volume 11, Article number: 13612 (2021).

# 原子層積層構造のバンド構造の計算

所属・氏名 マテリアルサイエンス・北川雄真

使用計算機: KAGAYAKI

## 概要

SIESTA を用いてグラフェン/MoS2 の積層構造についてバンド構造を計算した。グラフェンと MoS2 は格子不整合のため、積層構造の単位胞は擬似的に格子整合した系としてグラフェン単位胞を 5x5, MoS2 単位胞を 4x4 が重ね合わさったものを単位胞(図 1)として計算した。ツイストは取り入れていない。

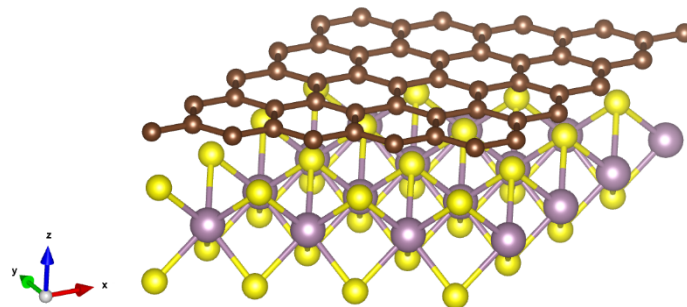


図 1. グラフェン/MoS2 の積層構造

計算条件として、Monkhorst-Pack 法を用いた 36 x 36 x 1 の波数グリッド、エネルギーカットオフは 500 Ry, 構造最適化には 0.0001 eV/Ang のトレランスを用いた。その結果、図 2 のバンド構造を得た。

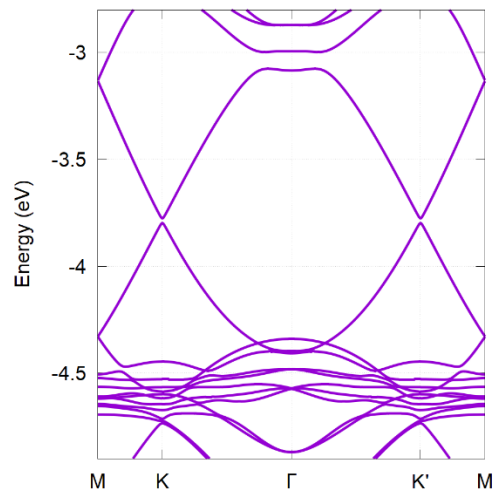


図 2. グラフェン/MoS2 のバンド構造

# Zeeman 効果を利用したスピンドバイスに関する研究

先端科学技術研究科 小松 颯

ナノマテリアルテクノロジーセンター 赤堀 誠志

使用計算機: KAGAYAKI

## 概要

半導体エレクトロニクスはデバイスの微細化によって成長してきたが、今後微細化による成長は限界に達することが予想されている。そこで電子の電荷とスピンを用いて動作するスピントロニクスデバイスの1つである、スピン電界効果トランジスタ(スピン FET)が注目されている。スピン FET 実現のための課題の1つは、強磁性体(FM)と半導体(SC)の間のコンダクタンスミスマッチによって生じる、FM-SC 接合における低いスピン注入・検出効率である。

Zeeman 効果を利用したスピンドバイス(図 1(a))は 2 次元電子ガス(2DEG)の上に FM ナノ構造と MIS ゲートナノ構造を横並びに持っているデバイスであり、FM-SC 接合を介さずにスピン注入・検出が可能な手段として注目されているものの、未だに作製・動作実証されていない。

そこで本研究では、実際にデバイスを作製・動作実証するために、InAs/GaAs(001)の表面反転層による 2 次元電子ガスをチャンネルとして用いたスピンドバイスの設計・性能評価を行った。計算はシュレディンガー方程式を伝達行列法により計算することで行った。設計されたスピンドバイスは、スピン偏極率±85%以上のスピン偏極電流が生成可能であることが示された。この成果は発表 1 で報告された。

また、2 つの Zeeman 効果を利用したスピンドバイスを組み合わせたスピントフィルタデバイス(図 1(b))を提案した。このスピントフィルタデバイスは、2 つのゲート電圧に対するコンダクタンスの挙動(図 2)よりスピンドバイスの動作評価に有用であることが示された。この成果は論文 1 で報告された。

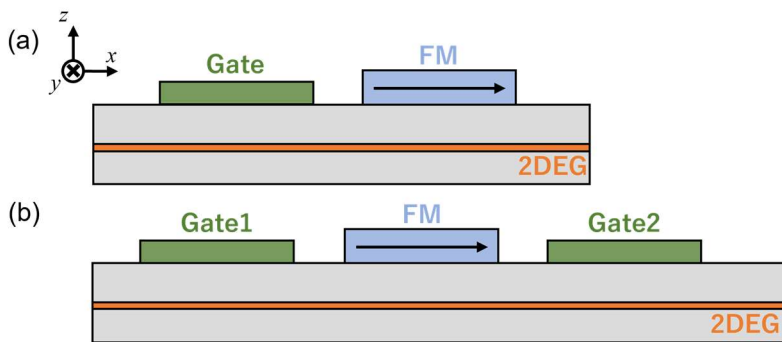


図 1 Zeeman 効果を利用したスピンドバイス(a)と、このスピンドバイスを組み合わせたスピントフィルタデバイス(b)

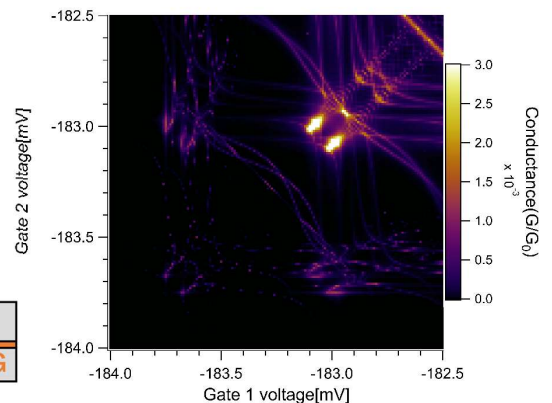


図 2 スピントフィルタデバイスコンダクタンスのゲート電圧依存性

## 関連学会発表

- 1) S. Komatsu and M. Akabori, "Design of semiconductor spin-polarizer utilizing the Zeeman effect", EM-NANO 2023, D-5, 石川県金沢市石川県地場産業センター, 6/5-8 (2023), オーラル.

## 関連発表論文

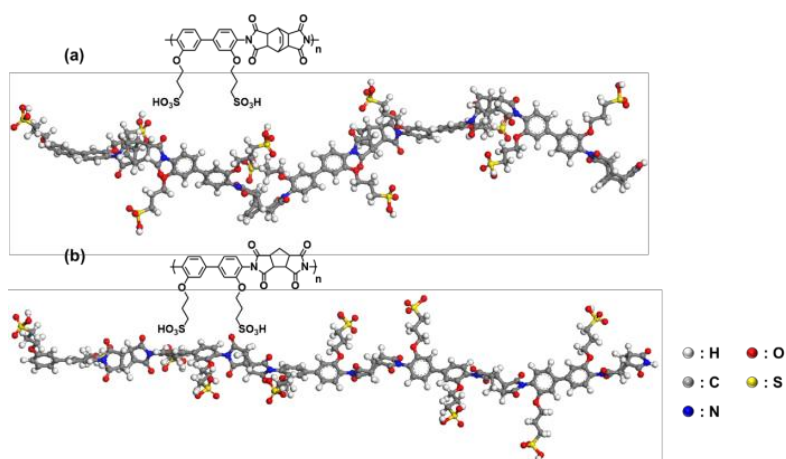
- 1) S. Komatsu and M. Akabori, "Spin-filter device using the Zeeman effect with realistic channel and structure parameters", Jpn. J. Appl. Phys. **63**, 02SP14(2023).

## Cross-linkable Sulfonated Polyimide Thin Film with High Proton Conductivity

School of Materials Science,  
Nagao Lab, Yao Yuze

Machine: Large Memory PC Cluster

Sulfonated semi-alicyclic polyimides have issues with poor mechanical and chemical stability in water. We synthesized a new sulfonated semi-alicyclic polyimide composed of bicyclo[2.2.2]oct-7-ene-2,3,5,6-tetracarboxylic dianhydride (BOEDA) and 3,3'-bis-(sulfopropoxy)-4,4'-diaminobiphenyl (BSPA), of which the contained dienophile structure can undergo Diels–Alder (D-A) reaction.[1] The BSPA-BOEDA thin film exhibited high proton conductivity of  $4 \times 10^{-2} \text{ S cm}^{-1}$  under 25 °C and 95% relative humidity (RH). The optimized molecular structures were calculated (Material Studio 2020; Dassault Systèmes). The calculations were done based on density functional theory (DFT) using a DMol3 module. The generalized gradient approximation (GGA) functional with the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) type was used to model the exchange and correlation interactions. The convergence threshold for the maximum force and maximum displacement for normal geometry optimization were set, respectively, as  $0.002 \text{ Ha } \text{Å}^{-1}$  and  $0.005 \text{ Å}$ . Figure depicts the optimized oligomeric structures of 5 repeating units for BSPA-BOEDA and a reported semi-alicyclic polyimide[2] by DFT calculation. The main chain of BSPA-BOEDA units showed lower planar rigidity. Therefore, the BSPA-BOEDA thin film remained in an isotropic phase-segregated structure rather than an anisotropic lamellar structure, which was confirmed by in situ humidity-controlled grazing incidence X-ray scattering, because the main chain rigidity is necessary for the expression of lyotropic liquid crystalline properties was much lower.



**Figure** Optimized structures of five repeating units of (a) BSPA-BOEDA and (b) reported semi-alicyclic polyimide[2].

Published paper:

[1] Y. Yao, M. Hara, S. Nagano, K. Aoki, and Y. Nagao. *Conference Proceedings of STEPI-12*, **12**, 49 (2024). <http://hdl.handle.net/10119/19046>

Reference:

[2] Y. Yao, H. Watanabe, M. Hara, S. Nagano, and Y. Nagao. *ACS Omega*, **8**, 7470 (2023).

## 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。