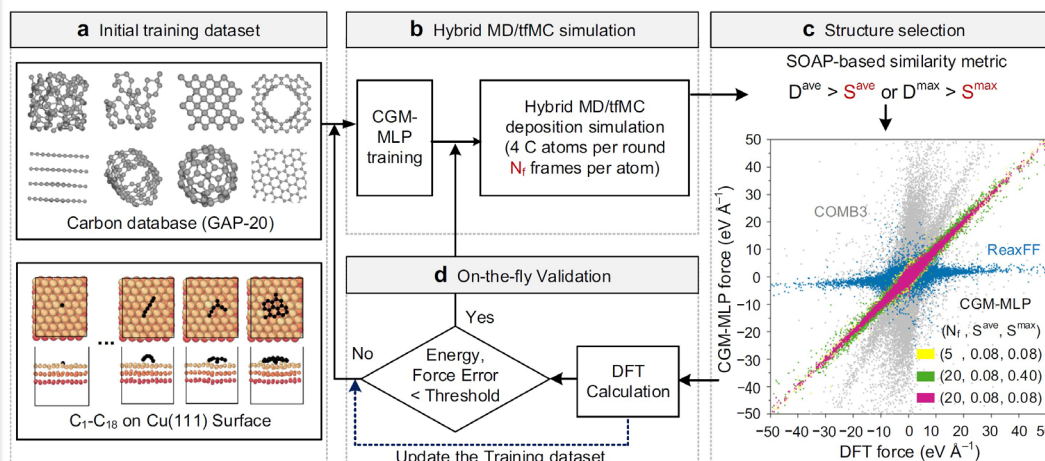


計算材料学センターだより



- Active Machine Learning Model for the Dynamic Simulation and Growth Mechanisms of Carbon on Metal Surface

CONTENTS

- ・センター長あいさつ
- ・アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ
- ・現スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR の運用終了
- ・計算材料学センター職員による研究成果の紹介
- ・令和5年度の計算材料学センター見学者
- ・令和5年度の計算材料学センターの技術支援の実績

表紙の図について

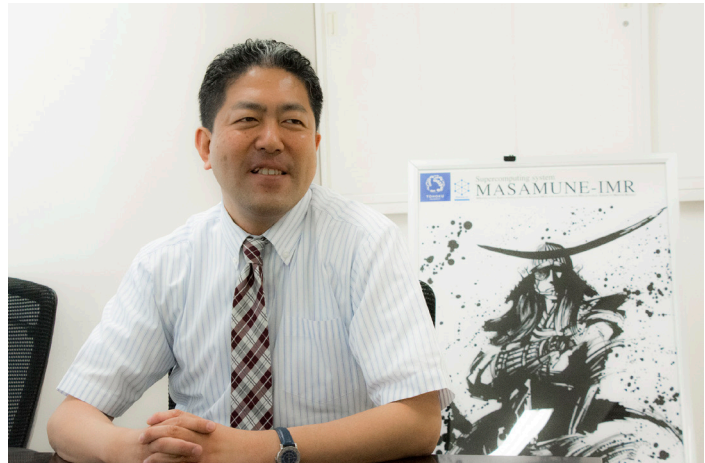
■ Active Machine Learning Model for the Dynamic Simulation and Growth Mechanisms of Carbon on Metal Surface

Substrate-catalyzed growth offers a highly promising approach for the controlled synthesis of carbon nanostructures. However, the growth mechanisms on dynamic catalytic surfaces and the development of more general design strategies remain ongoing challenges. Here we show how an active machine-learning model effectively reveals the microscopic processes involved in substrate-catalyzed growth. Utilizing a synergistic approach of molecular dynamics and time-stamped force-biased Monte Carlo methods, augmented by the Gaussian Approximation Potential, we perform fully dynamic simulations of graphene growth on Cu(111). Our findings accurately replicate essential subprocesses—from the preferred diffusion of carbon monomer/dimer, chain or ring formations to edge-passivated Cu-aided graphene growth and bond breaks by ion impacts. Extending our simulations to carbon deposition on metal surfaces like Cu(111), Cr(110), Ti(001), and oxygen-contaminated Cu(111), our results align closely with experimental observations, providing a practical and efficient approach for designing metallic or alloy substrates to achieve desired carbon nanostructures and explore further reaction possibilities.

□ D. Zhang, P. Yi, X. Lai, L. Peng, and H. Li, *Nature Communications*, **15**, 344 (2024)

センター長あいさつ

計算材料学センター長 久保百司



本センターは、スーパーコンピューティングシステム "MASAMUNE-IMR" の運営機関として、計算材料科学分野における計算資源の提供に加えて、多様な国家プロジェクトの運営・遂行を通して、計算物質科学分野の分野振興、コミュニティ形成、人材育成や、計算物質科学分野における新たなイノベーションの創成など多彩な活動を積極的に進めております。

令和5年4月から3年間のプロジェクトとしてスタートした文部科学省スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新 (DDCoMS)」(課題責任者:久保百司)は、現在、代表機関:東北大学 11名、協力機関:14機関 80名、連携機関:9機関 22名が参画する総勢113名の組織体制で運営しており、100名を超える方々のご尽力・ご協力を得ながら精力的な活動を進めております。本プロジェクトは、令和4年7月に文部科学省「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) 事業」に採択された A) 東北大学拠点 (構造材料)、B) 物質・材料研究機構拠点 (磁性材料)、C) 東京大学拠点 (電気化学材料)、D) 東京工業大学拠点 (エレクトロニクス材料)、E) 京都大学拠点 (バイオ・高分子材料) の5拠点の計算科学グループが共同で、スーパーコンピュータ「富岳」によってのみ実現可能な超大規模計算、超長時間計算、超大量計算に関するシミュレーション技術の開発をベースに、DxMT 事業の5拠点間の横串連携活動も促進することで、新たなデータ駆動型研究手法を創出することを目標としています。令和6年3月27日(水)には東北大学金属材料研究所の講堂にて、「2023年度スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム DDCoMS 公開シンポジウム / 計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS 次世代研究者セミナー / 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会」の名称で、本DDCoMSプロジェクトの成果報告会を対面にて開催させて頂きました。シンポジウムの冒頭には、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムを所管する文部科学省研究振興局計算科学技術推進室の国分政秀室長とDxMT事業の栗原和枝PD(東北大学教授)から、対面にてご挨拶を頂くとともに、69名(内民間企業12名)もの方のご参加を頂きました。令和6年度も同時期に、本DDCoMSプロジェクトの成果報告会を、東北大学金属材料研究所の講堂において対面にて開催予定ですので、ご興味がありましたら、是非、ご参加頂ければ有難く思います。

また、本センターが中心となって、平成27年8月から進めてきました計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)が、令和4年度末をもって8年間のプロジェクト期間を無事に終了し、

令和5年度に事後評価を受けました。令和5年10月30日(月)にオンラインでのヒアリングが実施され、12月25日(月)に最高評価のS判定という事後評価結果をご連絡頂くことができ、最高のクリスマスプレゼントとなりました。さらに、令和5年度に事後評価を受けた科学技術振興機構「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業(次世代研究者プログラム)」のうち、最高評価のS判定を頂いたのは、本PCoMSプロジェクトのみであったとのことで、非常に高い評価を頂いたことを大変喜んでおります。このような最高評価のS判定を頂くことができたことは、PCoMSの実施機関であります東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、大阪大学エマージングサイエンスデザインR³センターの関係各位に加え、これまでPCoMSプロジェクトにご尽力とご協力を頂きました多数の関係者の方々の多大なるご支援の賜物と大変感謝しております。本紙面をお借りして、PCoMSにご尽力、ご協力を頂きました方々に厚く御礼申し上げます。PCoMSは、令和5年3月で科学技術振興機構によるプロジェクト期間は終了致しましたが、令和5年4月以降も上記4機関で協力しながら、引き続き計算物質科学分野の人材育成活動を推進しております。具体的に、令和5年度に東北大学金属材料研究所が中心となって推進した事業の例としては、前述の令和6年3月27日(水)にDDCoMSと共催で実施した「2023年度計算物質科学人材育成コンソーシアムPCoMS次世代研究者セミナー」に加え、DDCoMS-PCoMS-RISMEセミナーシリーズとしてセミナーと講習会を計4回開催し、のべ229名(内民間企業80名)もの方にご参加頂きました(RISMEはDxMT事業の東北大学拠点)。今後とも、PCoMSでは活発な計算物質科学分野の人材育成活動を進めてまいりますので、皆様のご協力・ご支援を賜りますよう宜しくお願い申し上げます。

また、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所・計算科学研究センターの3研究所において、平成27年度から進めております材料科学、物性科学、分子科学の3分野に共通性の高い大規模並列計算を志向した大型プロジェクトに計算資源を支援させて頂く「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業」の幹事校を、令和5年度は東北大学金属材料研究所が務めさせて頂きました。その活動として、前述のようにDDCoMS、PCoMSと共催で令和6年3月27日(水)に東北大学金属材料研究所の講堂にて、「2023年度計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会」を開催させて頂きました。令和元年10月24日(木)-25日(金)以来のほぼ4年半ぶりに対面での報告会を開催できたことを大変喜んでおります。

本センターでは、令和6年7月末に現在のスーパーコンピューティングシステム“MASAMUNE-IMR”の運用を停止し、新しいスーパーコンピューティングシステムへのリプレイス業務を進めてまいります。令和6年8月以降の半年余りの期間、本センターからスーパーコンピューティングシステムの計算資源のご提供をさせて頂くことができないことを深くお詫び申し上げます。ご利用者様には大変ご不便をおかけ致しますが、ご理解のほど宜しくお願い申し上げます。新しいスーパーコンピューティングシステムは、令和7年4月からの運用開始を予定しておりますので、是非、新しいスーパーコンピューティングシステムにご期待を頂ければと思います。本センターでは、令和6年度もセンター職員が一丸となって、DDCoMS、DxMTなどの国家プロジェクトと連携、協力を進めながら、計算材料科学コミュニティの分野振興、コミュニティ形成、若手人材の育成などの活動を進めるとともに、スーパーコンピューティングシステムのリプレイス業務を進めてまいります。今後とも、計算材料科学センターへの皆様のご協力・ご支援をよろしくお願い申し上げます。

アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ

大規模並列計算サーバ

1. LAMMPS

汎用古典分子動力学アプリケーションである LAMMPS のバージョン 2Aug23 をインストールしました。LAMMPS は金属や半導体といった固体や生体分子やポリマーなどのソフトマターなど多くの系で動力学計算を行うことが可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:lammmps>

LAMMPS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.lammps.org/>

2. CP2K

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである CP2K のバージョン 2023.2 および 2024.1 をインストールしました。CP2K では固体や液体、分子などに対して構造最適化や分子動力学計算を行うことが可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:cp2k>

CP2K の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.cp2k.org/>

3. QUANTUM ESPRESSO

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである QUANTUM ESPRESSO のバージョン 7.3 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantum_espresso

QUANTUM ESPRESSO の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.quantum-espresso.org/>

アクセラレータサーバ

1. LAMMPS

汎用古典分子動力学アプリケーションである LAMMPS のバージョン 2Aug23 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:lammps>

LAMMPS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.lammps.org/>

2. QUANTUM ESPRESSO

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである QUANTUM ESPRESSO のバージョン 7.3 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantum_espresso

QUANTUM ESPRESSO の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.quantum-espresso.org/>

3. Materials Studio

分子構造や結晶構造の持つ特性と挙動の関係を予測するための総合的なモデリング・シミュレーション環境である Materials Studio のバージョン 2024 をインストールしました。本センターでは CASTEP、DMol3、Forcite Plus などの計算パッケージが利用可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:materials_studio

Materials Studio の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.3ds.com/ja/products-services/biovia/products/molecular-modeling-simulation/biovia-materials-studio/>

現スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR の運用終了

平成 30 年 8 月より運用してきました現在のスーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR は令和 6 年 7 月末をもって運用を終了します。令和 6 年 8 月以降は現システムに保存されているデータにはアクセスできませんので、必要なデータは必ず 7 月末までに各自でダウンロードしていただきますようお願いいたします。なお、ホーム領域 (/home/UID) に保存されているデータは新システムに移行しますが、それ以外のデータについては移行しません。いかなる理由があっても復元することはできませんので、ご注意ください。

現在、スーパーコンピューティングシステムの更新に向けて手続きを行っており、新システムの構成や移行スケジュールの詳細につきましては、決まり次第お知らせします。

皆様にはご不便をおかけしますが、何卒ご理解、ご協力のほどよろしくお願い致します。

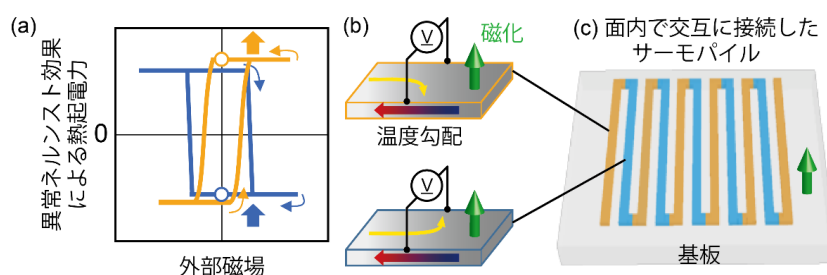


スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR

計算材料学センター職員による研究成果の紹介

東北大学金属材料研究所計算材料学センターの鈴木通人准教授(研究当時・現大阪公立大学教授)と、東北大学金属材料研究所の野口駿大学院生(研究当時)、藤原宏平准教授と塚崎敦教授、富山県立大学の柳有起准教授、物質・材料研究機構(NIMS)の平井孝昌研究員らの研究グループは、代表的な強磁性トポロジカル半金属であるコバルトスズ硫黄化合物の電子状態に着目し、元素置換した薄膜試料を作製することで、異常ネルンスト係数の符号を正・負の双方に制御できることを明らかにしました。

本研究成果はトポロジカル物質に基づく磁気熱電変換材料の開発やエネルギーハーベストの実現に向けた関連技術の高度化に寄与すると期待されます。本研究成果は2024年1月8日10:00(英国時間)に、科学誌Nature Physics オンライン版に掲載されました。



(a) 異常ネルンスト効果による熱起電力の符号の異なる物質の磁場応答(垂直磁気異方性の物質の場合)と(b)その模式図。(a)中の太矢印と白抜き丸は、試料面直上向き方向に磁化を配向させた状態を示す。(c)符号の異なる二つの層を交互に接続したサーモパイル。接続数に比例して、熱起電力が増加する。

プレスリリース:

トポロジカル磁性体の磁気熱電効果で起電力生成に成功 ゼロ磁場下でも熱電変換動作が可能で創エネや省エネに期待

東北大学ウェブサイト

<https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2024/01/press20240109-02-topo.html>

金研ウェブサイト

<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1554.html>

論文情報:

Bipolarity of large anomalous Nernst effect in Weyl magnet-based alloy films

Shun Noguchi, Kohei Fujiwara, Yuki Yanagi, **Michi-To Suzuki**, Takamasa Hirai, Takeshi Seki, Ken-ichi Uchida, Atsushi Tsukazaki

Nature Physics, Published online: 08 January 2024

<https://doi.org/10.1038/s41567-023-02293-z>

<https://doi.org/10.1038/s41535-023-00587-2>

令和5年度の計算材料学センター見学者

期間：令和5年4月～令和6年3月

見学日	見学者	所属／会議など
令和5年 6月 7日	学部生31名	東北大学工学部材料科学総合学科
令和5年 8月 2日	岩手県高校生43名	岩手県立水沢高等学校
令和5年 8月 9日	本郷研太氏	北陸先端科学技術大学院大学
令和5年 8月24日	高校教員及び保護者18名	第72回全国高等学校PTA連合会大会 2023宮城大会
令和5年 9月20日	仙台市高校生40名	宮城県仙台向山高等学校
令和6年 1月17日	杉山氏 他3名	東北大学金属材料研究所および学際領域 展開ハブ形成プログラム参画者
令和6年 1月25日	根岸和政氏 他4名	大阪大学大学院工学研究科コンプライ アンス室／東北大学 CFC 研修
令和6年 3月13日	池田陽一氏 他2名	東北大学金属材料研究所
令和6年 3月27日	国分政秀氏 山地延佳氏	文部科学省研究振興局／スーパーコン ピュータ「富岳」成果創出加速プログ ラム DDCoMS 公開シンポジウム

令和 5 年度の計算材料学センターの技術支援の実績

本センターは、所内のみならず、国内外の研究機関に計算機資源の提供をしており、ユーザーに対しての技術支援を行っています。令和 5 年度は所内 12 研究室および所外 63 研究機関へ合計 651 件の技術支援を行いました（表 1）。

技術支援の内容

計算機資源の提供、スーパーコンピューティングシステム関連の利用支援、アプリケーション関連の利用支援およびリモートアクセス等の接続支援など。

表 1. 技術支援先の内訳と件数

技術支援先	支援先研究機関の数	件数
所内	12 研究室	125
学内	5 研究機関	144
国内の研究機関	29 研究機関	264
国外の研究機関	29 研究機関 (14 ヶ国)	118
合計	75	651

計算材料学センターだより No.41

2024年 6月 4日 発行

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター



CCMS

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター
Center for Computational Materials Science

TEL (022) 215 - 2411

URL <https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/>

E-mail ccms-adm.imr@grp.tohoku.ac.jp