

計算材料学センターだより

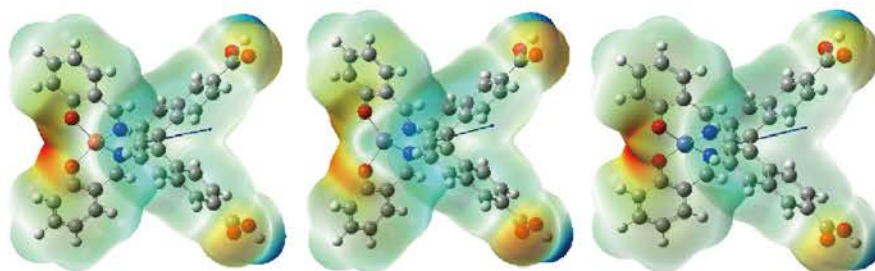


Fig 1. Cu 錯体

Fig 2. Zn 錯体

Fig 3. Ni 錯体

最適化構造での金属錯体の電子分布と双極子モーメントの方向
Electronic distribution and dipole moment direction of optimized metal complexes

CONTENTS

- ・センター長あいさつ
- ・平成 28 年度のスーパーコンピューティングシステム定期保守予定日
- ・計算材料学センターの URL の変更
- ・スーパーコンピューターの時間ノード管理
- ・アプリケーションのバージョンアップ
- ・平成 27 年度の計算材料学センターの技術支援の実績
- ・職員研修報告
- ・平成 27 年度の計算材料学センター見学者

CCMS
NEWS
25

表紙の図について

■ 色素増感太陽電池に向けたキラルシッフ塩基金属錯体の設計

古くから知られているキラルシッフ塩基金属錯体は、触媒・分子磁性体・蛍光プローブなどの機能への応用が近年注目されています。置換基導入や合成がしやすい利点がありますが、色素増感太陽電池の色素としての応用を念頭に置く場合、色素金属錯体単独の性質だけでなく半導体金属酸化物との吸着や複合化材料を考慮した分子設計も必要となります。本研究では、長波長の光を吸収しやすいナフチル基のジアミン誘導体を有する金属錯体(図1~3)を新たに選び、吸着構造の議論の足がかりとして、色素金属錯体単独の最適化構造、電子分布、双極子モーメントを見積もり、光学スペクトルの理論的予測を行いました。溶媒効果を取り入れたTD-DFT計算による電子分布からも、金属酸化物表面にはカルボキシ基で吸着しやすいことが確認されました。

今回の研究成果をふまえて、色素金属錯体の双極子モーメントと吸着する金属酸化物表面の位置関係に着目することで、さらに物性・機能性が向上するものと期待されます。

■ Design of chiral Schiff base metal complexes for DSSC

Recently chiral Schiff base metal complexes are expected application for catalysts, magnetic materials, and fluorescence probes. In this study, we carried out TD-DFT calculations for some new Schiff base metal complexes involving naphthyl moieties (Figs. 1-3) as a part of dye-sensitized solar cells (DSSC).

□ Y. Machida, T. Akitsu

□ R. Shoji, S. Ikenomoto, N. Sunaga, M. Sugiyama, T. Akitsu, J. Appl. Sol. Chem. Model., 5 (2016), pp: 48-56.

センター長あいさつ

計算材料学センター長 毛利 哲夫

新年度が始まりました。今年度もセンターの職員一丸となって計算機の効率的な運用にあたる所存です。ユーザー各位を始めとして皆様の変わらぬご支援をお願いします。新年度にあたり、いくつかの御報告、あるいは計画についてここに述べさせていただきます。

昨年度は高騰する電気代への窮余の対応策として 60%の部分稼働での運用を行ってきましたが、お陰さまで一年間の収支決算は極めて僅かですが黒字会計で終了することができました。しかし、このような部分稼働がユーザーの皆様にとぼした影響や、共同利用の成果に及ぼすネガティブな側面については今後十分に解析していく必要があると考えています。今年度は運営交付金に課される効率化係数(大学改革促進係数)の増大により、収入はさらに減少するために、60%稼働をしても膨大な赤字決算になることは必至です。これを回避するために対応策を練っているところですが、具体化しましたら皆様にもお知らせしたく、改めてお願い申し上げます

京プロジェクトは終了し、これに伴って計算材料科学研究拠点も閉じることになりました。計算材料学センターをハード、計算材料科学研究拠点をソフトと見なしながら、両者を車の両輪のようにして運営してきましたので、計算材料科学研究拠点の閉鎖は残念ですが、「ポスト京プロジェクト」や「計算物質科学人材育成コンソーシアム事業」も新たに始まり、スタッフもこれらに移行しますので不連続を生じることなく活動を進行させることができると考えています。

特に「京」時代に金研、物性研、分子研で行ってきました計算機資源の 20%までの共用供出は、これからも共通運用の新たな枠組みで継続していくことになりました。今後ともかかる活動を通じて、「京」の時代に培ってきました物性、分子、材料の連携活動に寄与していくつもりです。既に共通運用の為の第一回運営委員会を開催し、課題の採択方法や成果の発表、報告についても3センターで合意に至りました。

電気代高騰に対する対応策の一環として、昨年度10月より時間・ノード積の管理機能を導入し、計算機資源の有効な利活用を目指してきました。年度末までに2回の再調整・再割り当て作業を行いましたが、有効な調整・割り当て方法の考案は暗中模索の状態であり、今後、センター側も経験を蓄積していく必要があると考えています。ユーザー各位からの忌憚のない御意見を伺えれば幸いです。又、これに関連して募集要項の改正も行う予定です。これまでは新年度が始まってからの中途申請も受け付け、随時、審査や採択を行ってきました。しかし、かかる中途申請は課題申請を忘れた人達の「定常枠」に墮しており、年度初めの時間・ノード積の割り当てにも影響を及ぼしています。時間・ノード積の管理を形骸化させないためにも、中途申請の受付について見直しを図りたいと思います。

本センターでは5年毎に機種を更新を行ってきました。このスケジュールによれば来年4月に新機種に更新することになりますが、ユーザーコミュニティのニーズと、スパコンの市場動向、さらに、他の計算センター

の更新スケジュールもにらみながら、更新を 1 年間遅らせることに決めました。今後、調査、調整、審査、採択等のステップを踏んでいくこととなりますが、間違いのない選択をする所存です。特に、ユーザーや所内の要望を反映させるべく、アンケート調査を行いたいと考えています。ご協力くださいますようお願いいたします。

以上、いくつかの点についてご報告しましたが、いずれも極めて重大な課題ととらえています。皆様からの忌憚のないご意見をお願いいたします。

最後になりましたが、今年 3 月 31 日をもちまして、技術補佐員の佐久間竜氏と事務補佐員の加藤顕枝氏が退職し、4 月 1 日から計算材料科学研究拠点・事務補佐員であった門脇希氏を新たにセンターに任用、さらに 5 月 16 日から山田麻美氏を技術補佐員として採用したことをご報告します。

平成 28 年度のスーパーコンピューティングシステム定期保守予定日

スーパーコンピューティングシステムは、基本的に奇数月の最終週の月曜日に定期保守を行っています。

今年度、スーパーコンピューティングシステムは以下の日程で定期保守を行う予定です。また、片平キャンパスの計画停電の際にも停止する予定です。保守時間はその時の保守内容によって異なりますので、詳細についてはそのつど、メールでお知らせいたします。皆様のご協力をどうぞよろしくお願いいたします。

定期保守予定日

2016 年（平成 28 年）奇数月の最終週月曜日

5 月 30 日、7 月 25 日、9 月 26 日、11 月 28 日

2017 年（平成 29 年）奇数月の最終週月曜日

1 月 30 日、3 月 21 日

片平キャンパスの計画停電の予定

2016 年 8 月 7 日（日）7:30 から 18:00 まで

定期保守日については、センターのホームページでも案内しています。

<http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/Jpn/news/maintenanceyear.php>

計算材料学センターの URL の変更

2016 年 5 月 9 日より計算材料学センターのホームページのアドレスが変更となりました。新しい URL は以下の通りです。お気に入りやブックマークに登録されている方は設定変更をお願いいたします。

<http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/>

スーパーコンピューターの時間ノード管理

昨年度後半よりスーパーコンピューターの時間・ノード積(以下、時間ノードと略す)の管理を行いました。詳細な背景につきましては、センターだより 24 号をご一読いただきたく存じますが、昨年度の経過と今年度の運用についてご報告いたします。

昨年 9 月に各課題に対して時間ノードの割り当てを行い、各ユーザーの時間ノードを管理する機能を導入し、10 月より運用を開始しました。センターでは課題申請者から要求のあったスーパーコンピューターの利用時間ノードの合計がスーパーコンピューターの利用可能な時間ノードに収まるように、各課題に割り当てました。割り当て時間ノードの値については、課題採択委員の先生方による評価も考慮して決定しました。課題代表者は割り当てられた時間ノードを各分担者に配分し、これをセンターに連絡していただき、センターでユーザー毎の時間ノードを登録することにより管理しています。登録された時間ノードを超過するとユーザーはスーパーコンピューターへ新規のジョブが投入できなくなります。この機能の運用に関するご質問はホームページの FAQ に掲載されていますので、ご覧ください。

全ての課題が割り当てられた時間ノードを消費しないと計算機資源を有効に利用できないため、定期的にノード時間の消費状況を確認しました。12 月の時点では課題ごとに時間ノードの消費率を算出し、年度内までに予想される消費率が 100%を超える課題に対して、再度申請書を提出してもらうことを条件に、再割り当てしました。さらに、2 月の時点では、割り当てられた時間ノードを使い切ったユーザーに対して、再度時間ノードの割り当てを行いました。

課題代表者はセンターにお問い合わせいただくことで、分担者の利用状況を確認することができます。また、課題に対する総時間ノード内であれば課題代表者がセンターに依頼することで、分担者の時間ノードの配分を随時調整することが可能です。しかしながら、昨年度の実績を見ても、課題としては割り当てられた時間ノードに十分余裕があるにもかかわらず、一部のユーザーが時間ノードを使い切っているという状況でした。そこで、今年度は課題代表者に対して月の初めに前月末の時点での分担者の利用状況をメールにてお知らせいたしますので、各分担者の利用状況を把握いただき、配分時間を調整される場合にはセンターまでご連絡ください。

今年度の時間ノード割り当てに際しては、課題採択委員の先生の評価だけでなく、継続課題については昨年度の実績についても考慮しました。なお、今年度も使用状況に応じて割り当て時間ノードの調整をする可能性がありますので、お含みおきください。引き続き、ユーザーの皆様の計画的なジョブ投入をお願いいたします。

アプリケーションのバージョンアップ

アプリケーションサーバー

1. Atomistix ToolKit (ATK)および Virtual NanoLab (VNL)

第一原理電子状態計算ソフトウェア ATK-DFT および ATK-DFT の GUI である VNL を 2015.1 にバージョンアップしました。

ATK-DFT 2015.1 では主に次のような改良が行われました。

- ・ GGA と MGGA における実空間密度の打ち切りが小さい値の場合におこる収束性の問題を改善
- ・ Spin Transfer Torque を計算するスクリプト作成を改善

VNL 2015.1 では主に次のような改良が行われました。

- ・ Window を最大化した場合の見栄えを改善

実行方法:

http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_atk.html

Official web site:

<http://www.quantumwise.com/>

平成 27 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。平成 27 年度の技術支援内容と件数について、所内 10 研究室および、所外 46 研究機関へ合計 333 件の支援を行いました(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、ネットワークの設定、リモートアクセス等の接続支援、および大判プリンタの利用支援。

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	10 研究室	92
学内	6 研究機関	69
国内の研究機関	20 研究機関	91
国外の研究機関	20 研究機関 (10ヶ国)	81
合計	56	333

職員研修報告

東北大学サイバーサイエンスセンターへの研修

技術職員 大滝 大河

2016年1月18日(月)から22日(金)までの5日間、丹野技術職員と共に東北大学の全学情報基盤センターであるサイバーサイエンスセンターで研修させていただきました。お忙しい中、今回の研修に対応いただいたサイバーサイエンスセンターの方々には、大変感謝しております。

今回の研修では、スーパーコンピューターのSX-ACE、並列コンピューターのLX406Re-2、三次元可視化装置等のシステムや施設設備の見学、利用者管理や課金管理、高速化支援等の技術職員の仕事内容を教えていただくことができました。システムの運用や利用者の管理、利用者への支援等の様々な部分において、計算材料学センターとの違いを感じることができ、とても充実した研修となりました。今回の研修での経験を活かし、計算材料学センターでの仕事をより一層良いものにしたいと思います。

東北大学サイバーサイエンスセンターでの研修について

技術職員 丹野 航太

2016年1月18日(月)～22日(金)の期間に、東北大学サイバーサイエンスセンターで研修させていただきました。5日間にわたる研修では、スーパーコンピューターSX-ACEや冷却施設、分散コンピューター博物館の見学や職員の方たちによる基盤センター運用に関する講習や実習、スーパーコンピューターの運用やユーザー支援に関する情報交換を行いました。

運用に関する講習では、スーパーコンピューターの利用方法や利用者・課金管理、高速化支援などについて講習していただき、当センターでは行っていない課金の実際、利用者数の違いによる管理方法の違い、研究所と違い様々な分野のユーザーがいる中でのユーザー支援についてなど、普段の業務だけでは得られないことを深く学ぶことができました。また、実習では、アカウントを発行していただき、実際にスーパーコンピューターSX-ACEにログインして利用方法やプログラムの高速化を行いました。自分の手で操作したり、自作のプログラムをSX-ACE向けにチューニングするなど貴重な体験を通して、他のシステムでのコンパイル方法の違いや使い勝手を知ることができ視野を広げることができたと思います。講習や見学以外の時間にも職員の方々には質問など丁寧に対応していただき、最終日には研修のまとめと計算材料学センターの業務についてプレゼンテーション形式で研修成果の報告と情報交換を行いました。この研修を通してサイバーサイエンスセンターでの業務について知ることや東北大学内での新しい関わりができ、とても刺激的で充実した研修でした。今後はこの経験を計算材料学センターの運用に役立てていきたいと思っています。

最後となりましたが、東北大学サイバーサイエンスセンターの方々には本当にお世話になりました。このような貴重な機会を与えて頂き、大変感謝しております。

平成 27 年度の計算材料学センター見学者

期間:2015 年 4 月～2016 年 3 月

見 学 日	見 学 者	所 属 / 会 議 な ど
2015 年 4 月 15 日	進路体験学習 15 名	石巻市立桃生中学校
2015 年 4 月 22 日	マテリアル・開発系プレゼミ 31 名	東北大学大学院工学研究科・工学部
2015 年 6 月 25 日	Nemykin Victor 氏	Department of Chemistry & Biochemistry, University of Minnesota Duluth
2015 年 7 月 13 日	出浦 桃子氏	東北大学金属材料研究所
2015 年 7 月 13 日	梅津 理恵氏	東北大学金属材料研究所
2015 年 7 月 23 日	研究所連携若手ワークショップ 20 名	東北大学
2015 年 8 月 7 日	青森県立八戸北高等学校 19 名	青森県立八戸北高等学校
2015 年 9 月 7 日	久保 百司氏 他 7 名	「表面創成工学の新展開」研究会
2015 年 9 月 25 日	新関 智彦氏 他 30 名	若手向けスクール 「スピントロニクスとスピン流」
2015 年 11 月 12 日	山形県立楯岡高校 21 名	山形県立楯岡高校
2016 年 3 月 8 日	古川学園中学校 25 名	学校法人古川学園 古川学園中学校

他 見学者総数 171 名



■ 石巻市立桃生中学校進路体験学習 15 名
2015 年 4 月 15 日



■ マテリアル・開発系プレゼミ 31 名
2015 年 4 月 22 日



■ 研究所連携若手ワークショップ 20 名
2015 年 7 月 23 日



■ 若手向けスクール
「スピントロニクスとスピン流」30 名
2015 年 9 月 25 日



■ 山形県立楯岡高校 21 名
2015 年 11 月 12 日



■ 古川学園中学校 25 名
2016 年 3 月 8 日

計算材料学センターだより No.25

2016年5月19日(木)発行

19th May (Thu), 2016

東北大学金属材料研究所 計算材料学センター
〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平二丁目1番1号
電話 (022) 215-2411 FAX (022) 215-2166

URL <http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/>
E-mail ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp



Center for Computational Materials Science of IMR,
Tohoku University
2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, Japan
Tel: +81-22-215-2411 (DIAL-IN), FAX: +81-22-215-2166

CCMS
Supercomputing system