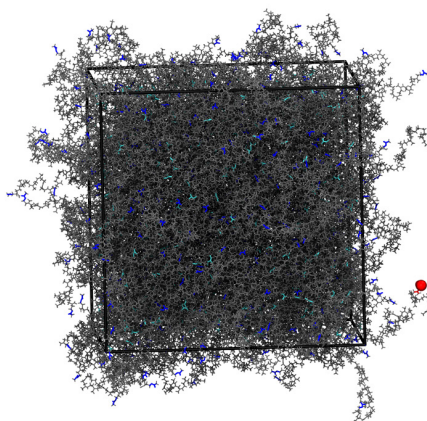
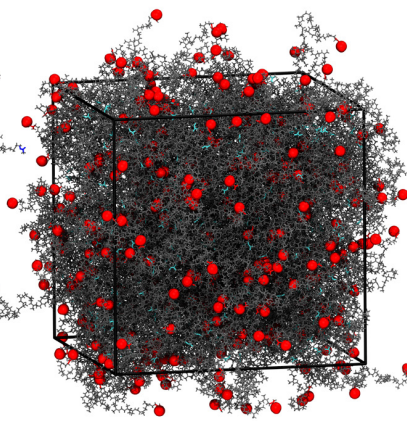


計算材料学センターだより

(A) $P_1 ({}_{\omega}PI_{\alpha 1})$



(B) $P_{11} ({}_{\omega}PI_{\alpha 2})$



■ The role of terminal groups of cis-1,4-polyisoprene chain in the formation of physical junction points in Natural Rubber

CONTENTS

- ・センター長あいさつ
- ・コンパイラ、ライブラリのインストール
- ・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
- ・令和5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
- ・高速化支援サービスの成果
- ・計算材料学センター職員による研究成果の紹介
- ・令和4年度の計算材料学センター見学者
- ・令和4年度の計算材料学センターの技術支援の実績

CCMS
NEWS
39

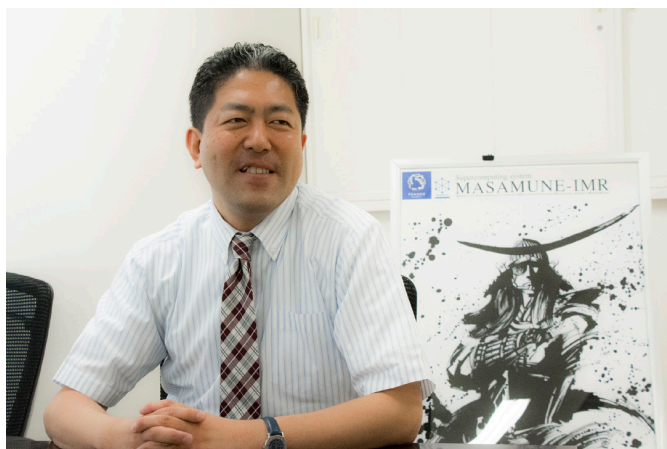
■表紙の図について

■ The role of terminal groups of cis-1,4-polyisoprene chain in the formation of physical junction points in Natural Rubber

The terminal structures of cis-1,4-polyisoprene chains play an important role in the formation of natural networking structure of natural rubber which provides excellent mechanical properties to Hevea Natural Rubber (NR) such as crack growth resistance, good elasticity and strain induced crystallization. The terminals of cis-1,4-polyisoprene chain of natural rubber consists of two types of terminal groups i.e. ω and α terminal groups. The structures of ω terminal (dimethyl allyl-(Trans-1,4-isoprene)₂) and six types of α terminals of NR have been investigated by using solid state NMR study. We investigate seven types of cis-1,4-polyisoprene (PI) melt systems with different combination of terminal groups: Hydrogen, dimethyl allyl-(Trans-1,4-isoprene) as ω and ester-terminated isopentene (α 1), hydroxy-terminated isopentene (α 2), ester-terminated isobutane (α 3), hydroxy-terminated isobutane (α 4), ester-terminated 1,4- cis-isoprene (α 5) and hydroxy-terminated 1,4-cis-isoprene (α 6) i.e., ${}_{\text{H}}\text{PI}_{\text{H}}$ (PI₀) : pure PI (Hydrogen terminal), ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 1}$ (PI_I), ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 2}$ (PI_{II}), ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 3}$ (PI_{III}), ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 4}$ (PI_{IV}), ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 5}$ (PI_V) and ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 6}$ (PI_{VI}). In the above Figures (A) and (B), we show snapshots of the systems PI_I and PI_{II} at equilibrium as typical cases, where main cis-1,4-polyisoprene chain part is drawn by gray color, ester-terminated isopentene (α 1) by blue color in Figure (A) and hydroxy-terminated isopentene (α 2) by red color in Figure (B). By using the potentials of mean force $W(r)$ between terminals, we calculated the cluster-formation-fraction of terminal groups associated in clusters of given size in the seven systems. We found that in the ${}_{\text{H}}\text{PI}_{\text{H}}$, ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 1}$, ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 3}$ and ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 5}$ systems no firm cluster formation is observed (Figure (A), no cluster formation between α 1 terminals), in the ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 2}$, ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 4}$ and ${}_{\omega}\text{PI}_{\alpha 6}$ systems, on the other hand, stable clusters of α 2, α 4 and α 6 terminals with a size s ($2 \leq s \leq 6$) are observed (Figure (B), the cluster formation between α 2 terminals is shown red color spheres), which supports the formation of physical junction points in between hydroxy terminated polyisoprene chains through α 2, α 4 and α 6 terminals of them. These physical junction points might be crucial for superior properties of NR such as high toughness, crack growth resistance and strain induced crystallization.

センター長あいさつ

計算材料学センター長 久保百司



「富岳」を頂点とする日本の計算資源のヒエラルキーの中で、本センターはその第2階層である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、分野振興、コミュニティ形成、人材育成などの多彩な活動を積極的に進めております。

日本のフラッグシップスーパーコンピュータである「富岳」の運用は、令和2年度から開始され、同じく令和2年度からスタートしたスーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム19課題が、令和4年度をもって3年間のプロジェクト期間を終了しました。これに伴い、令和5年1月5日～2月6日にかけて、令和5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の募集が行われ、令和5年3月24日に文部科学省のホームページ上において17件の新規採択課題が公開されました。

幸いにも、本センターがまとめ役となって申請させて頂いた課題「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）が採択され、令和5年4月から3年間のプロジェクトがスタートしました。本プロジェクトは、元素戦略プロジェクトの後継事業として、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、DxMT事業における成果創出を加速するために、スーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の獲得を目的に申請した課題になります。本課題では、スーパーコンピュータ「富岳」によってのみ達成可能な超大規模計算、超長時間計算、超大量計算を実現するシミュレーション技術の開発をベースに、新たなデータ駆動型研究手法を創出することによって、文部科学省が進める我が国が材料研究・材料開発で世界を先導するための「マテリアル研究DXプラットフォーム構想」の実現を加速することを目標としています。本プロジェクトは、上記の5拠点で5つのサブ課題を構成する体制で、代表機関：東北大学10名、協力機関：14機関58名、連携機関：13機関22名が参画する総勢90名もの大所帯のプロジェクトとなっています。毎年、年度末には、東北大学金属材料研究所の講堂にて、本DDCoMSプロジェク

トの成果報告会を対面で開催させて頂くことを予定しておりますので、ご興味がありましたら、是非、ご参加を頂ければ有難く思います。

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」の令和5年度の幹事校は東北大学金属材料研究所が仰せつかっております。令和5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に採択された計算物質科学分野の採択課題の中から応募のあった3課題を、新たに「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業」の認定課題とさせて頂きました。これにより、現在、「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業」の認定課題とさせて頂いておりますのは、DxMT事業の5拠点、令和3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の1課題、令和5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の3課題となっております。本センターでも、これら国の大型プロジェクトの成果創出に「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業」を通して、さらなる支援・協力をさせて頂ければと思っております。

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致しました。本コンソーシアムでは、前センター長の毛利哲夫先生が平成27年度～令和元年度までコンソーシアム長を務められ、その後を私が引き継ぐ形で、令和2年度～令和4年度までコンソーシアム長をさせて頂きました。無事に、8年間もの長期にわたるPCoMSプロジェクトのプロジェクト期間を終了できましたことは、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プロジェクトにご支援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尽力の賜物と大変感謝しております。本紙面をお借りして、PCoMSにご支援、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月でプロジェクト期間は終了致しましたが、今後も上記の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続けてまいります。特に、令和4年7月にDxMT事業に採択された5拠点、令和5年3月に「富岳」プロジェクトに採択されたDDCoMSなどの国家プロジェクトと連動・連携しながら、引き続き活動と運営を進めて行く予定です。今後とも、関係各位のご協力・ご支援を賜りますよう宜しくお願い申し上げます。

本センターでは、令和5年度もセンター職員が一丸となって、国際共同利用・共同研究施設の使命を全うし、さらに計算材料科学分野の発展を加速するために、DDCoMS、DxMTなどの国家プロジェクトやPCoMSと連携、協力を進めながら、日本国内に加え世界における計算材料科学コミュニティの振興、計算材料科学分野の若手人材の育成、さらには世界の材料科学分野全体に貢献する新たなイノベーションの実現を果たしていきたいと考えております。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。

コンパイラ、ライブラリのインストール

アクセラレータサーバ

1. GNU コンパイラ

GCC 8.5.0 および 11.3.0 をインストールしました。

使用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=user_manual:acceleratorserver:compilers_libraries#gnu_コンパイラ

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. VASP

PAW 型擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算パッケージである VASP のバージョン 6.4.0 をインストールしました。VASP では様々な系に対して、密度汎関数理論に基づく電子状態計算を高速で行うことができ、構造最適化・応答関数・化学反応などの計算も可能です。

Wannier90 をリンクした実行モジュールも利用可能です。

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:vasp>

VASP の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.vasp.at/>

2. WIEN2k

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 WIEN2k のバージョン 23.2 をインストールしました。WIEN2k では、(L)APW+lo 法を用いた高精度のバンド構造計算をすることが可能です。また、相対論効果を考慮した全電子計算をすることが可能です。

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:wien2k>

WIEN2k の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://susi.theochem.tuwien.ac.at/>

3. ABINIT

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 ABINIT のバージョン 9.8.2 をインストールしました。ABINIT では固体の全エネルギーや電荷密度、電子状態などの計算を行うことが可能です。また、構造最適化や分子動力学計算、フォノンや Born 有効電荷、誘電テンソルなどを求めることも可能です。

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:abinit>

ABINIT の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

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

4. 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 2023.1 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/>

5. Elk

全電子計算法に基づく第一原理計算アプリケーションである Elk のバージョン 8.7.6 をインストールしました。Elk ではバルク・表面・磁性体などの系の高精度な密度汎関数計算が可能であり、LDA+U 法、スピン軌道相互作用・ノンコリニア磁性の評価、フォノン計算などに対応しています。

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:elk>

Elk の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://elk.sourceforge.io/>

6. ALAMODE

格子振動の非調和性を考慮した格子熱伝導率の計算のためのプログラムパッケージである ALAMODE のバージョン 1.4.2 をインストールしました。VASP や Quantum ESPRESSO などの第一原理計算プログラムや LAMMPS の計算結果からフォノン由来の特性の計算が可能です。

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:alamode>

ALAMODE の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://alamode.readthedocs.io/>

7. SALMON

時間依存密度汎関数理論に基づく実時間・実空間グリッド法を用いた光励起電子ダイナミクスシミュレータである SALMON のバージョン 2.1.0 をインストールしました。線形光応答、パルス光による非線形光応答を計算可能であり、数千原子からなる超並列大規模計算も可能です。

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:salmon>

SALMON の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://salmon-tddft.jp/>

アクセラレータサーバ

1. VASP

PAW 型擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算パッケージである VASP のバージョン 6.4.0 をインストールしました。

Wannier90 をリンクした実行モジュールも利用可能です。

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:vasp>

VASP の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.vasp.at/>

並列計算・インフォマティクスサーバ

1. ANSYS Mechanical CFD

有限要素法による解析ツールである ANSYS Mechanical CFD を 2022R2 にバージョンアップしました。

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:ansys_mechanical_cfd

ANSYS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.ansys.com/>

2. Mathematica

科学技術計算ソフトウェア Mathematica を 13.2.1 にバージョンアップしました。
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:mathematica>

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

<https://www.wolfram.com/mathematica/>

令和5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2か月に1度、定期保守を行っています。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致します。

令和5年度の定期保守予定

- ・令和5年 5月29日（月）
- ・令和5年 7月31日（月）～8月7日（月）
- ・令和5年 9月25日（月）
- ・令和5年11月27日（月）
- ・令和6年 1月29日（月）
- ・令和6年 3月18日（月）

片平キャンパスの計画停電の予定

- ・令和5年 8月 5日（土）～6日（日）

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。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/maintenance.html>

高速化支援サービスの成果

計算材料学センターでは 2019 年度より大規模並列計算サーバおよびアクセラレータサーバの有効利用を目的として、以下の高速化支援サービスを実施しています。

(1) プログラム並列化・高速化支援サービス

申請者が独自に開発したプログラムで、性能が見込まれるものに対して、大規模並列計算サーバでのチューニング（並列化、対応ライブラリへの接続など）を行います。

(2) GPGPU 移植・高速化支援サービス

申請者が独自に開発した並列化済みのプログラムで、GPGPU への対応による性能向上が見込まれるものに対して、GPGPU への移植・チューニング（OpenACC/CUDA 化、CUDA 対応ライブラリへの接続など）を行います。

申請は公募制となっており、計算材料学センターで審査を行って採択の可否を判断させていただき、それぞれ年間最大 2 件を採択しています。2022 年度は GPGPU 移植・高速化支援サービスに 1 件の申請があり、採択しました。

GPGPU 移植・高速化支援サービスで採択した分子動力学プログラムでは、疎行列演算を行うライブラリを GPGPU 用にビルドし、プログラムにリンクすることで GPGPU を使用して実行できるようにしました。ご提供いただいた小規模のテストジョブでは演算時間に対してデータ転送時間が長くなり CPU での実行よりも速くなりませんでした。行列サイズが大きく、演算量の多い計算の場合は高速化が図れる可能性があります。

2023 年度の募集は終了いたしました。申請状況によっては追加募集する可能性もございますので、その際にご連絡差し上げます。詳細につきましては、以下のサイトをご覧ください。

プログラム並列化・高速化支援サービス：

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/service/xc50.html>

GPGPU 移植・高速化支援サービス：

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/service/gpgpu.html>

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 准教授は、東京大学大学院工学系研究科の高木寛貴 大学院生（研究当時）、高木里奈 助教（研究当時）、関真一郎 准教授ら研究グループ、同物性研究所の中島多朗 准教授、同先端科学技術研究センターの有田亮太郎 教授らとの共同研究を通じて、スピンの立体的な配列に起因して電子の進行方向が曲げられる現象「トポロジカルホール効果」を、磁化を持たない反強磁性体において実証することに成功しました。

本研究成果は 2023 年 4 月 20 日（英国夏時間）に英国科学誌「Nature Physics」オンライン版に掲載され、「反強磁性体におけるトポロジカルホール効果の実証に成功 —磁気情報の新しい読み出し手法としての活用に期待—」として東京大学・東北大学・大阪大学・富山県立大学・理化学研究所・日本原子力研究開発機構などが共同でプレスリリースしています。

プレスリリース：

反強磁性体におけるトポロジカルホール効果の実証に成功

—磁気情報の新しい読み出し手法としての活用に期待—

東北大学ウェブサイト

<https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2023/04/press20230421-02-topological.html>

金研ウェブサイト

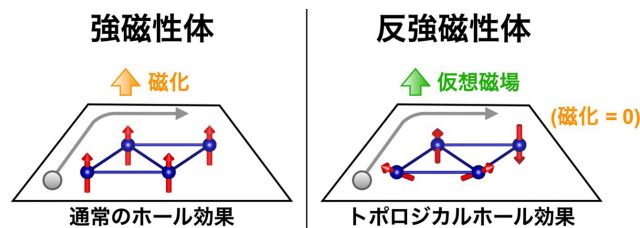
<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1513.html>

論文： Spontaneous topological Hall effect induced by non-coplanar antiferromagnetic order in intercalated van der Waals materials

H. Takagi, R. Takagi, S. Minami, T. Nomoto, K. Ohishi, **M.-T. Suzuki**, Y. Yanagi, M. Hirayama, N. D. Khanh, K. Karube, H. Saito, D. Hashizume, R. Kiyonagi, Y. Tokura, R. Arita, T. Nakajima, and S. Seki

Nature Physics, Published online: 20 April 2023

<https://doi.org/10.1038/s41567-023-02017-3>



図：磁化を持つ強磁性体における通常のホール効果と、磁化を持たない反強磁性体におけるトポロジカルホール効果。前者では磁化が、後者では立体的なスピン配列が誘起する仮想磁場が、それぞれ電子（灰色の円）の進行方向を曲げる原因となる。赤い矢印はスピンの向きを表している（共同プレスリリースより引用）。

令和4年度 計算材料学センター見学者

期間：令和4年4月～令和5年3月

令和4年度は見学の受け入れを再開しました。

見学日	見学者	所属／会議など
令和4年 6月29日	学部生27名	東北大学材料工学序説
令和4年 7月11日	森岡利仁氏 他4名	SCREEN セミコンダクター ソリューションズ
令和4年 7月12日	田代憲史氏	三菱ガス化学株式会社
令和4年 7月26日	陣内丈志氏	(株)キング・テック
令和4年10月19日	仙台市高校生34名	宮城県宮城第一高等学校
令和4年10月21日	木村直人氏 他4名	文部科学省
令和4年11月 1日	本部財務部長 他5名	東北大学本部事務
令和4年11月 9日	佐藤鉄太郎氏	NEDO
令和4年12月 7日	Tran Ngoc KHIEM氏 他1名	HANOI University of Science and Technology
令和4年12月20日	仙台市高校生41名	宮城県仙台向山高等学校
令和4年12月22日	Eun-Ae CHOI氏 他1名	Korea Institute of Materials Science
令和5年 2月20日	池田陽一氏 他3名	東北大学金属材料研究所



宮城県仙台向山高等学校見学の様子
令和4年12月20日

令和 4 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 4 年度は所内 11 研究室および所外 72 研究機関へ合計 606 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	11 研究室	69
学内	7 研究機関	108
国内の研究機関	31 研究機関	294
国外の研究機関	34 研究機関 (14 ヶ国)	135
合計	83	606

計算材料学センターだより No.39

2023年 6月 2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