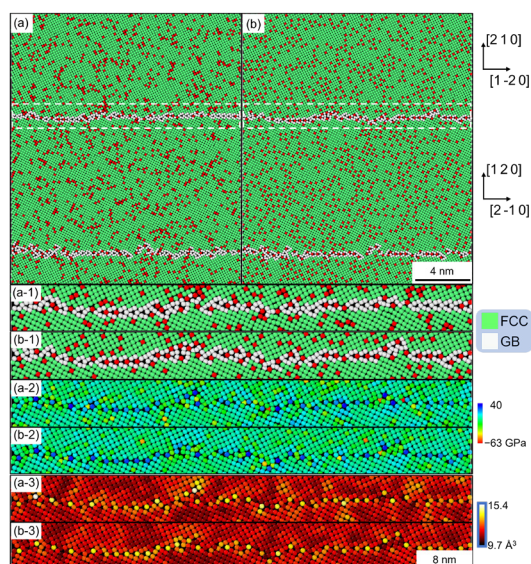


計算材料学センターだより



■ Atomistic simulation of grain boundary segregation in an Ni-Mo alloy

CONTENTS

- ・ 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
- ・ 計算材料学センター職員による研究成果の紹介
- ・ SC23 に本センター職員が参加
- ・ AVS/Express 講習会の開催
- ・ YouTube 「ぎんけんちゃんチャンネル」で計算材料学センターの紹介動画を公開
- ・ 見学の様子

表紙の図について

■ Atomistic simulation of grain boundary segregation in an Ni-Mo alloy

Using a hybrid Monte Carlo (MC)/molecular dynamics (MD) simulation, we have studied the segregation behavior of Mo atoms at $\Sigma 5$ (210)[001] symmetric tilt grain boundaries (GBs) of an Ni-11.11at%Mo alloy. By comparing Fig. (a-1) and Fig. (b-1), it is found that the random distribution of red Mo atoms in the vicinity of GB at the beginning of simulation transforms to the regular arrangement at 240 ps. Mo atoms segregate at the core sites of GB. Meanwhile, the interfacial layers maintain the ordered GB structure. The distribution map of atomic stress in Figs. (a-2) and (b-2) indicates that the core sites of GB are usually the blue tensile stress sites. The distribution map of atomic volume in Figs. (a-3) and (b-3) indicates that the yellow core sites of GB have the large atomic volumes. The core site in the kite-shaped structure unit has the largest site volume and exhibits tensile stress field. Further, we studied 3D situations for Mo segregation, which showed more details.

□ J. Li, K. Yamanaka, A. Chiba, Unpublished results.

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. Intel oneAPI

Intel oneAPI 2022.3.1 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#intel コンパイラ

2. NVIDIA HPC SDK

NVIDIA HPC SDK 22.11 および 23.1 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#nvidia_hpc 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 6.4.1 および 6.4.2 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. 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 9.10.3 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/>

3. ADF

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 ADF を 2023.103 にバージョンアップしました。ADF は相対論効果を含めることができ、遷移金属や重元素を取り扱うことが可能です。また、構造最適化や遷移状態計算、IR スペクトルや紫外・可視吸光スペクトル、NMR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:adf>

ADF の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

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

4. QuantumATK

非平衡グリーン関数法による電子輸送計算アプリケーションである QuantumATK を 2022.12-SP1 にバージョンアップしました。QuantumATK では半経験的もしくは第一原理的手法により、材料の電気伝導特性を計算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:quantumatk>

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

<https://www.synopsys.com/ja-jp/silicon/quantumatk.html>

5. 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 7.2 をインストールしました。QUANTUM ESPRESSO では全エネルギーや構造最適化計算をすることが可能です。また、フォノンや X 線吸光スペクト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: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. 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 6.4.2 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/>

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 7.2 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/>

並列計算・インフォマティクスサーバ

1. ADF-GUI

ADF用のグラフィカルユーザーインターフェースであるADF-GUIを2023.103にバージョンアップしました。ADF-GUIでは、エネルギー準位図や3次元データの等値面に加え、分子の振動モードなどのアニメーションを簡単に表示することができます。

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:adf-gui>

ADF-GUIの詳細については、以下のWebサイトをご覧ください。

<https://www.molsis.co.jp/materialscience/ams/adf-gui/>

2. QuantumATK NanoLab

QuantumATK専用グラフィカルユーザーインターフェースであるQuantumATK NanoLabを2022.12-SP1にバージョンアップしました。QuantumATK NanoLabでは、分子や材料のモデルをグラフィカルに作成できるほか、3次元データの可視化なども可能です。

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:quantumatk_nanolab

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

<https://www.synopsys.com/ja-jp/silicon/quantumatk/resources/features.html#nanolab>

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らと、神戸大学大学院理学研究科の小手川恒准教授らを中心とした研究グループは、反強磁性的物質 NbMnP が巨大な異常ホール効果を示すことを発見しました。今後、関連する機能性材料の開発や反強磁性体を用いた磁気デバイスへの発展が期待されます。

本研究成果は 2023 年 10 月 11 日（日本時間）に、「npj Quantum Materials」に掲載されました。

プレスリリース：

巨大な異常ホール効果を示す新しい反強磁性的物質を発見

神戸大学ウェブサイト

https://www.kobe-u.ac.jp/research_at_kobe/NEWS/news/2023_10_17_01.html

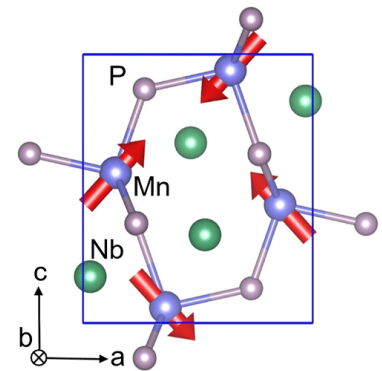
論文情報：

Large anomalous Hall effect and unusual domain switching in an orthorhombic antiferromagnetic material NbMnP

Hisashi Kotegawa, Yoshiki Kuwata, **Vu Thi Ngoc Huyen**, Yuki Arai, Hideki Tou, Masaaki Matsuda, Keiki Takeda, Hitoshi Sugawara, and **Michi-To Suzuki**

npj Quantum Materials **8**, 56/1-7 (2023)

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



図：NbMnPの反強磁性磁気構造
単位胞内の4つのMnの磁気モーメントは打ち消しあうが、強磁性と等価な対称性を持つため異常ホール効果が発現する。
出典：神戸大学プレスリリース

SC23 に本センター職員が参加

2023年11月12日(日)から17日(金)に開催されたSC23(Supercomputing Conference 2023)に、寺田特任准教授が参加しました。SCは毎年行われるハイパフォーマンスコンピューティング・ネットワークング・ストレージ分野における世界最大の国際会議です。このカンファレンスは各国企業、大学、研究所からの発表や展示で構成されています。今年のSC23は米国デンバーにてハイブリッド形式で開催されました。14,000人を超える参加者があり、438の展示がありました。

本センターを含む東北大学内のスーパーコンピュータを有する金属材料研究所、サイバーサイエンスセンター、流体科学研究所が合同でブース展示を行いました。ブースでは、本センターのMASAMUNE-IMRの紹介やMASAMUNE-IMRを用いた研究成果の展示、来訪者への対応などを行いました。また、各メーカーや研究機関のブース訪問や、ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)技術やスーパーコンピュータに関わる研究に関する講演の聴講、機械学習に関するチュートリアルへの参加により、情報収集を行いました。



SC23 での展示ブースと会場の様子

AVS/Express 講習会の開催

AVS/Express はモジュールを組み合わせることによって簡単にデータの可視化ができる汎用 3 次元可視化ソフトウェアです。当センターではユーザがスーパーコンピュータで得られた計算結果の可視化のために AVS/Express をご利用できるようにしております。

AVS/Express の初級者やこれから利用をお考えの方向けに、概要、基本操作、モジュールの紹介、操作実習、可視化相談という内容で、2023 年 6 月 9 日に Zoom オンラインによる AVS/Express 講習会を開催いたしました。

当センターでは、AVS/Express オンデマンドセミナーコンテンツもご用意しておりますので、当センターホームページよりアクセスしてご利用ください。

The screenshot shows a Zoom meeting window. The main content is a presentation slide with a teal background. The slide title is 'AVS/Express講習会' (AVS/Express Workshop) and the date/time is '2023年6月9日 13:00 - 17:00'. The schedule is as follows:

13:00 - 13:30	AVS/Expressの紹介
13:30 - 14:50	AVS/Expressの使用法
14:50 - 15:00	休憩
15:00 - 15:30	AVS/Expressのデータフォーマット
15:30 - 16:20	画像、動画ファイルの作成
16:20 - 16:30	休憩
16:30 - 17:00	CCMSライブラリの紹介

At the bottom of the slide, there is a note: '※Zoomにログインしましたら、表示名を所属、お名前に変更お願いします。AVS/Expressのインストールがまだの方はこちらをご参照ください'.

The Zoom interface on the right shows three participants: Yoji Matsumoto (top), Fumitaka HAYASHI (middle), and another participant (bottom). The meeting title is 'ミュージシャン館のオリジナル サウンド:オフ'.

AVS/Express 講習会の様子

AVS/Express オンデマンドセミナー：

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/public_info/avs_ondemand.html

YouTube「きんけんちゃんチャンネル」で計算材料学センターの紹介動画を公開

新型コロナウイルスの流行が落ち着きを見せる中、2023年10月7日（土）に開催された研究所公開片平まつりにおいて、金属材料研究所の一般公開「きんけん一般公開 2023（片平まつり）」が完全予約制で開催されました。当計算材料学センターを含むセンター・研究室では、きんけん一般公開の企画の一環として研究1分紹介動画「きんけん1min. 研究紹介」を作成し、開催日当日に一般公開会場にて上映しました。

計算材料学センターが作成した動画では、計算材料学センターの研究グループがスーパーコンピュータを使ってどのような研究を行っているのかをわかりやすく紹介しています。作成した動画は現在、YouTube ショートとして、YouTube「きんけんちゃんチャンネル」、および、きんけん一般公開のホームページにて、公開されています。

◆ YouTube「きんけんちゃんチャンネル」

<https://www.youtube.com/channel/UChclFUxaFfGzmO1i5CCOL6g>

◆ きんけん一般公開 HP

<http://www.imr.tohoku.ac.jp/kids/bullet-talk/>



【1min研究紹介】スーパーコンピュータを使った磁性研...

見学の様子

4月1日より「新型コロナウイルス感染拡大防止のための東北大学の行動指針（BCP）」がレベル0に移行し、計算材料学センターでは平常通り見学を受け入れています。見学に際しては、基本的な感染対策を行った上で皆様にご協力いただき実施しています。



・8月2日 岩手県立水沢高等学校生徒に説明を行う久保センター長



・8月24日 第72回全国高等学校PTA連合会大会2023宮城大会にて説明を行う鈴木准教授



・9月20日 宮城県仙台向山高等学校生徒に説明を行う鈴木准教授と中野技術職員

計算材料学センターだより No.40
2023年12月20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