「富岳」で効率良く材料設計を実現する

NTChem

量子化学ソフトウェア NTChem の紹介

研究代表者

計算科学研究センター
量子系分子科学研究チーム
中嶋 隆人（チームリーダー）

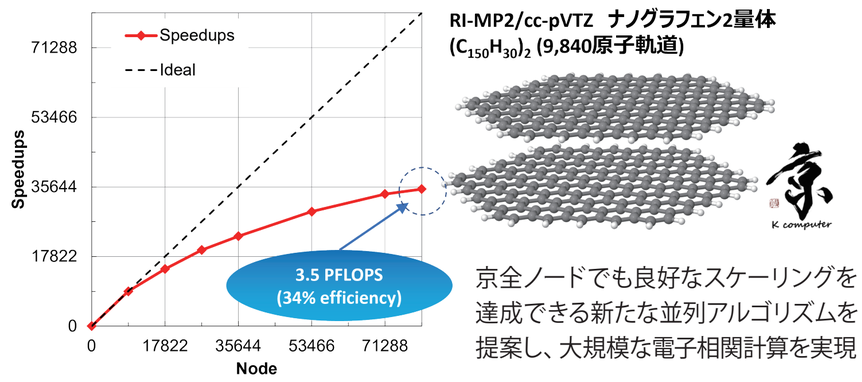
背 景

量子化学ソフトウェアを活用することで、材料設計や創薬など様々な産業において研究開発を効率化したり加速化したりすることが可能です。NTChem は「富岳」のようなスーパーコンピュータと組み合せて利用することで、企業での研究開発の効率化や加速化を図ることが可能な国産の汎用量子化学ソフトウェアです。

概 要

NTChem では他の量子化学ソフトの持つ多くの機能をカバーしながら、大規模で複雑な分子に対して高精度な量子化学シミュレーションを実現する独自の機能が利用できます。「富岳」のような高並列な計算機環境を有効に活用できるように設計されていますので、大規模分子の丸ごと計算や多数の分子に対する同時計算を効率良く行うことが可能です。

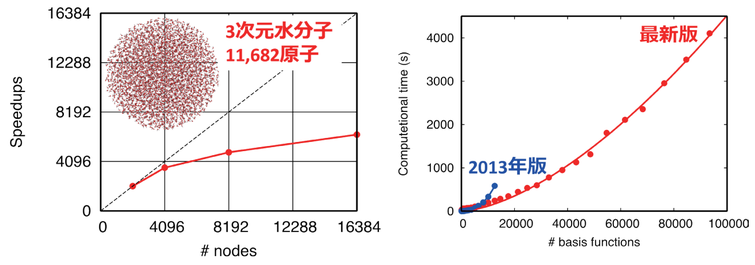
図1 大規模分子の高精度計算を実現



京全ノードでも良好なスケーリングを達成できる新たな並列アルゴリズムを提案し、大規模な電子相関計算を実現

世界記録のMP2計算を京80,199ノード641,592コアを用いて実行、13分で計算終了 (実行効率34%, 3.5PFOPS)

図2 1万原子分子の量子化学計算を実現



- 従来は計算不可能な11,682原子分子の密度汎関数法計算を「京」16,384ノードで実現。
- 「NTChem」と「富岳」を使って**10万~100万原子**規模の量子化学シミュレーションが実現できる見通し。現在、「富岳」で高度化を実施中。

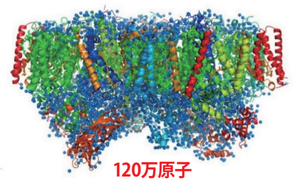
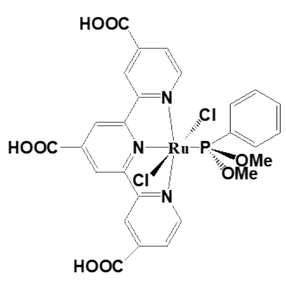


図3 色素増感型太陽電池のメカニズム解明



DX1錯体

NTChemに実装されたSO-TDDFTを使ってはじめて、吸収スペクトルを再現することが可能（図中の円はスピン禁制励起に由来）

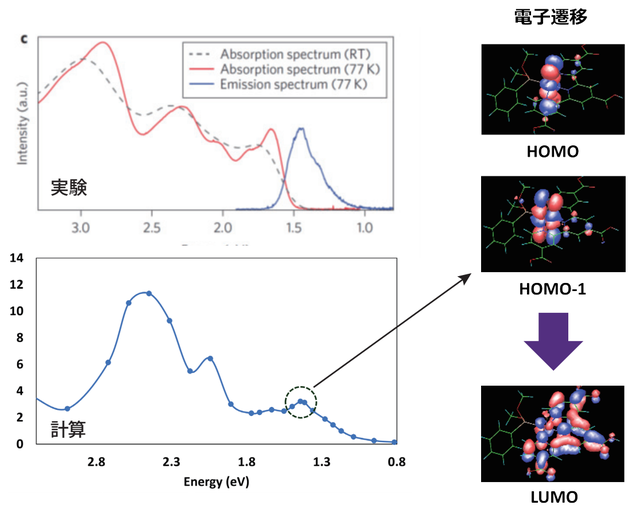
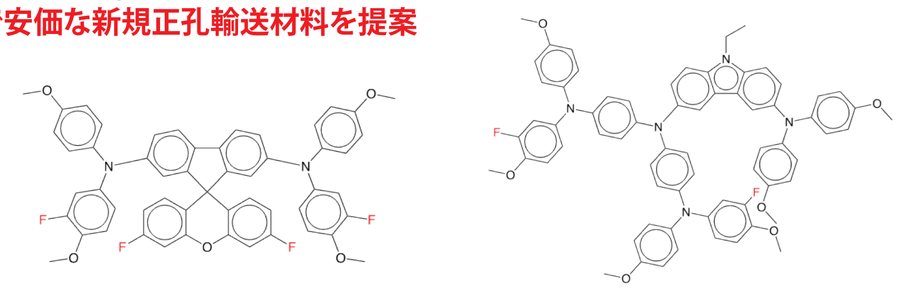


図4 次世代太陽電池材料の分子設計

NTChemを使った量子化学シミュレーションとインフォマティクスを活用することで、spiro-OMeTADに代わる**ペロブスカイト太陽電池向けの高効率で安価な新規正孔輸送材料を提案**



24.4%, SAscore: 3.74　　24.0%, SAscore: 3.48

新規正孔輸送材料候補

ポイント

- 「富岳」を最大限に活かすことのできる汎用量子化学ソフトウェア
- ユーザーニーズを反映して開発しているコミュニティーソフトウェア
- 独自開発の理論に基づいた量子化学計算が可能

応 用

- 次世代太陽電池のような革新的光エネルギー変換材料の分子設計
- エネルギー革新に向けた全固体二次電池材料の分子設計
- 項間交差を利用した有機エレクトロニクス・スピントロニクス材料の分子設計

【 参考文献 】

1. T. Nakajima, M. Katouda, M. Kamiya, Y. Nakatsuka, Int. J. Quantum Chem. 115, 349–359 (2015).
2. W. Dawson, 澤田啓介 , 神谷宗明 , 中嶋隆人 , シミュレーション , 38, 87–93 (2019).

※ 本研究は、文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現」(JPMXP1020210317) の一環として実施し、また、公益財団法人計算科学振興財団による研究教育拠点（COE）形成推進事業に係る研究助成を受けています。

RIKEN 理化学研究所

理研鼎業 RIKEN Innovation

本件に関するお問合せ
株式会社理研鼎業　戦略企画部
senryaku@innovation-riken.jp

※理化学研究所の産業連携窓口は委託により理研鼎業にて承ります。