

DFT計算による分子レベルの有機無機界面の相互作用状態解析

JSR株式会社 須藤翔太郎

目的 有機分子と固体表面の原子レベルでの相互作用様式を明らかにすることで、分子設計に関する知見を獲得する。

内容 2024年度に引き続き、周期系DFT計算コードのQuantum Espressoを用いて、有機分子・固体表面間の相互作用状態の解析を行った。

結果 社内の計算サーバーでは1つのDFT計算あたり一週間以上の計算時間を要するが、SQUIDの汎用CPUを1ノード用いて2日程度で計算を完了できた。分子構造や固体表面構造を変えた多数のDFT計算を現実的な計算時間で実施でき、分子設計に関する知見を獲得できた。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間 約3,200 ノード時間

使用メモリ 最大120 GB

ソフトウェア Quantum Espresso