

高エントロピー合金の機械学習力場の構築

大阪大学大学院基礎工学研究科 大戸達彦

目的 非従来型の触媒設計

内容 9つの元素を含む合金の機械学習力場を構築

結果 表面構造について偏りのないサンプリングを行うための古典力場を、第一原理分子動力学計算の結果を学習させることで構築した。触媒活性評価に使える精度を持つ機械学習力場を構築することができた。

Adv. Mat. **35**, 2207466 (2023).

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ
並列化

OCTMEM

180時間
6TB
16並列

FeMoMnCoCrZrTiNbNi合金

216原子
(各原子24個)

