

計算科学による複合材料設計

大阪大学 工学研究科住友電工共同研究講座

山崎隆浩、荻原寛之、靱田浩義、赤田巧

目的 界面特性を制御した複合材料を計算科学を利用して設計する

内容 第一原理計算プログラムなどを用い大規模系を精度よく扱う手順を確立し、材料設計ツールとして利用する

結果 1000原子規模までの様々な系（粒界を含む結晶や異種材料界面構造）の構造最適化や有限温度計算を第一原理計算プログラム PHASE/0を用いて行った。これらの結果を教師データとするNNP作成のために必要な知見を積み重ねている。また、鉄鋼材料中の母相に対する析出物の整合性の第一原理計算による評価を試み、いくつかの課題が明らかになった。

利用した計算機 SQUID汎用CPU
およびGPUノード

利用資源 16,250 SQUIDポイント

使用ソフトウェア PHASE/0-2022.01、
LAMMPS (+DeePMD)

並列化 汎用CPUノード：最大76x8 MPI 並列
GPUノード：最大8GPU並列

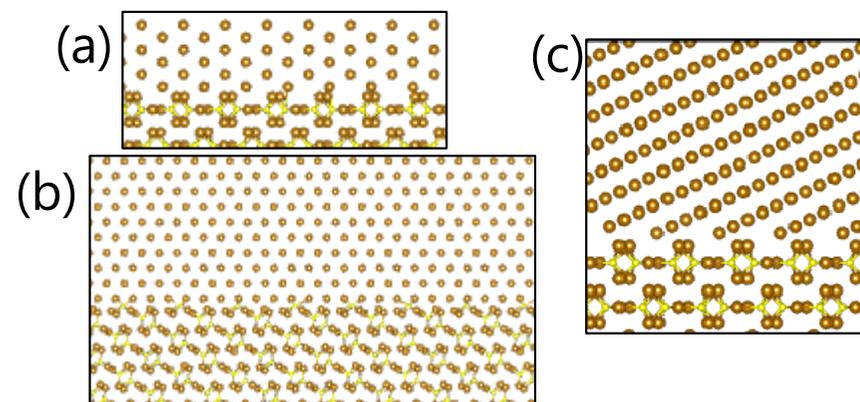


図 PHASE/0で計算したFe/Fe₃C界面構造モデル
それぞれ、(a) BAモデル、416原子、(b) ISモデル、904原子、(c) PPモデル、910原子。上部がFe、下部がFe₃C。