

機械学習によるSi力場モデルの構築と分子動力学シミュレーションへの応用

大阪大学 工学研究科マテリアル生産科学専攻 浜口研究室 小谷雄大

目的: 第一原理計算と同等の予測精度を持つ機械学習原子間ポテンシャルにより Si 入射と Ar 入射の高精度な物理スパッタリングシミュレーションを行うこと

内容, 結果: 従来の機械学習原子間ポテンシャルでは困難であった物理スパッタリングシミュレーションへの応用範囲を拡張した. PAW 法を用いた訓練データの生成においては, 表面構造, アモルファス状態, および 2 原子から 4 原子までの小さなクラスター構造を取り入れることで, 物理スパッタリング過程における構造の多様性を網羅し, 実験値に近いスパッタリング率を示す機械学習原子間ポテンシャルの開発に成功した.

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	12945 時間
使用メモリ	9.76 GB
並列化	8ノード 並列

