

計算科学による複合材料設計

大阪大学 大学院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

- 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と機械学習ポテンシャルを使った大規模系を連携する手順を確立し、材料設計ツールとして利用する
- 結果** 金属カーバイドや化合物半導体の様々な系（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。金属カーバイドと金属結合材が解離する反応の第一原理計算シミュレーション結果などを新たに教師データに加え NNP（ニューラルネットワークポテンシャル）を更新した。

利用した計算機 SQUID汎用CPU
およびGPUノード

利用資源 11,000 SQUIDポイント

使用ソフトウェア PHASE/0-2023.01、
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

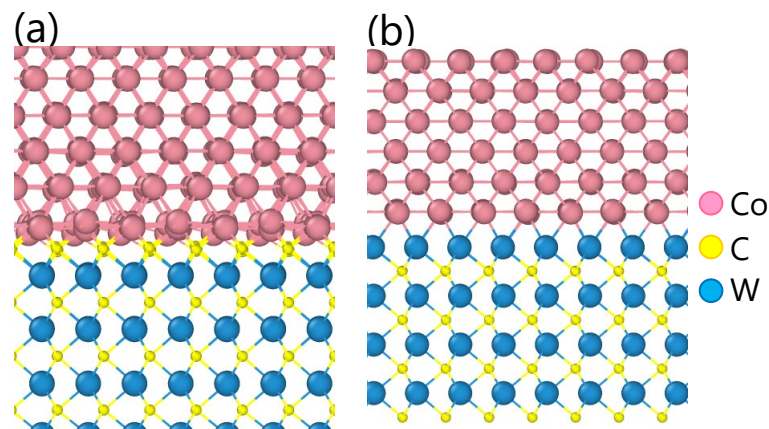


図 WC/Co界面の解離反応計算モデル
(a) WC(0001)C面/Co (b) WC(0001)W面/Co