

SiO₂ エッチング分子動力学シミュレーション のための機械学習原子間力場の構築

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 田中駿也

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の作成およびスパッタリング/
エッチングシミュレーションへの適用

内容: 能動学習を用いて, グラフニューラルネットワークに基づいた機械学習ポテンシャルを作成した. また,
近接相互作用にZBLポテンシャルを組み合わせることで, 従来の熱力学的平衡状態における典型的
な分子動力学シミュレーションだけでなく, エッチング/スパッタリングシミュレーションへの適用が可能
となった.

結果: SiO₂基盤を用いたエッチングシミュレーションでは, 経験的ポテンシャルよりも実験値に近い値を示した.

利用した計算機: SQUID 汎用GPUノード群
ノード時間 3738 時間
使用メモリ 9.76 GB
並列化 1ノード 8GPU並列

