

# Molecular Dynamics Analysis of Deformation and Fracture Process of WC-Co Cemented Carbides using Machine Learning Potential

Graduate School of Engineering Science, The University of Osaka

佐谷彩夏、西井佑亮、越智春陽、田中颯眞、Jiaqin Xu、Shihao Zhu、小幡純輝、安東裕輝、  
Yangen Li、Md. Hossain Rana、新里秀平、尾方成信

目的 機械学習ポテンシャルを用いた分子動力学解析により、切削工具等に用いられる超硬セラミックスの変形・破壊メカニズムを理解する。

内容 タングステンカーバイド-コバルト(WC-Co)系のニューラルネットワークポテンシャルを構築し、焼結体の変形・破壊解析を実施した。

結果 構築したポテンシャルは、WCおよびCoの力学特性に関して第一原理計算の結果をよく再現することを確認した。構築したポテンシャルを用いた引張解析ではCo含有量を調整することにより変形・破壊モードが変化し、強度および靱性が向上することを示した。

利用した計算機 SQUID GPUノード群  
ノード時間 10,000 時間  
使用メモリ 68 GB  
並列化 2ノード 並列

