

# 結晶構造予測手法のベンチマーク

パナソニックテクノロジー本部 横山智康

目的 予測精度の観点から構造予測手法のベンチマークを行う

内容 Materials Projectよりランダムにサンプリングした40化合物の組成に対し、USPEXコードを用いて構造予測を実施

結果 平均計算コストは計算モデルの原子数あたり6.3h/atomであった。正解率は6%であった。特に対称性が低い構造や、セルの異方性が高い構造で予測が外れる傾向が明らかとなった。

利用した計算機

ノード時間

使用ストレージ

SQUID

230000時間

100TB

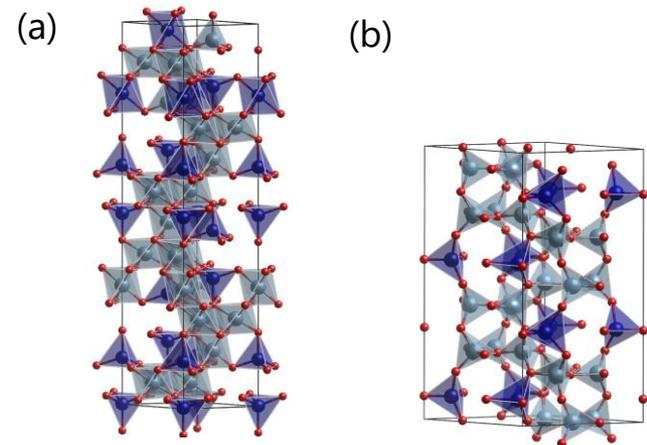


図 Al<sub>2</sub>CoO<sub>4</sub>の(a)正解構造と(b)不正解予測構造