

次世代コンデンサを目指した誘電体材料の網羅的計算

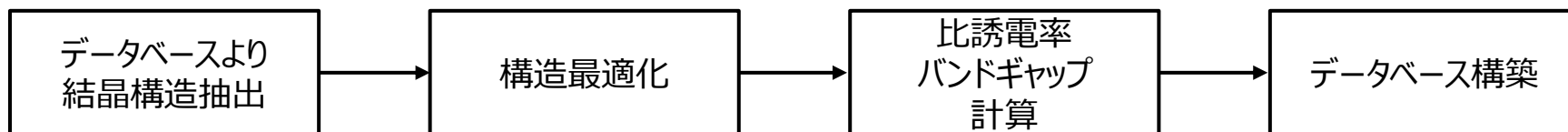
パナソニック株式会社 菊地 諒介

目的

Materials Project[1]などの第一原理計算データベースから候補材料の結晶構造を抽出し、比誘電率とバンドギャップを網羅的に計算し、データベースを構築する。

内容

下記のフローで計算を実施した。計算にはVASP[2, 3]を使用した。

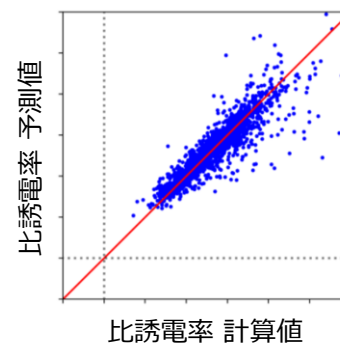


結果

21年度はさらに約1000件以上の結晶構造を追加し、合計約6000件の結晶構造に対し、比誘電率とバンドギャップの網羅的計算を行った。最終的に約4000件の比誘電率計算が完了し、比誘電率データベースの構築に成功した。これらのデータを用いて、機械学習による比誘電率予測モデルの構築を実施した。

利用した計算機
ノード時間

OCTOPUS
約54万時間



[1] <https://materialsproject.org>

[2] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169–11186 (1996).

[3] G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758–1775 (1999).