

第一原理計算等を用いた熔融金属の光学特性

大阪大学 接合科学研究所 氏名 加藤 進

目的 レーザーを用いた溶接や加工などで重要な熔融金属の光学特性を第一原理計算等により解明する.

内容 古典分子動力学コードLAMMPSおよび第一原理計算ライブラリQuantumESPRESSOやVASPを用いて、原子構造や電子状態を計算し、複素誘電率を求める.

結果 熔融状態の銅の複素誘電率を求めた.

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	約6,000時間
使用メモリ	約150 GB
並列化	2~8ノード 並列

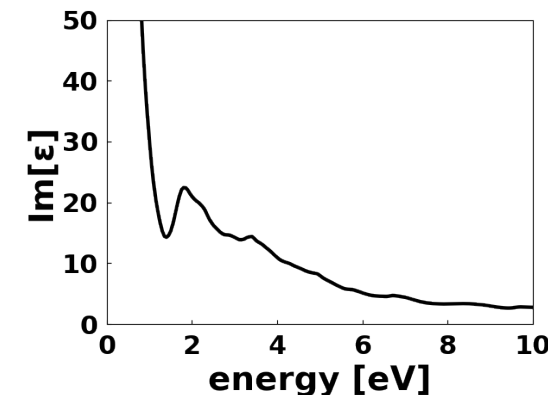


図 シミュレーションで求めた複素誘電率の虚部の一例