

計算科学による複合材料設計

大阪大学 大学院工学研究科住友電工共同研究講座

山崎隆浩、荻原寛之、靱田浩義

- 目的 界面特性を制御した複合材料を計算科学を利用して設計する
- 内容 第一原理計算プログラムと機械学習ポテンシャルを使った大規模系を連携する手順を確立し、材料設計ツールとして利用する
- 結果 金属カーバイドや化合物半導体の様々な系（粒界を含む結晶や異種材料界面構造）の構造最適化や有限温度計算を第一原理計算プログラムPHASE/0を用いて行い、その結果を教師データとする①。これから機械学習ポテンシャルを作り②、分子動力学（MD）計算を行う③。結果を可視化し、破綻している場合はそれらの構造を採取する④。これら①から④の手順を繰り返し安定的なMD計算ができる手順を確立した。

利用した計算機：SQUID汎用CPU、およびGPUノード

利用資源：13,000 SQUIDポイント

使用ソフトウェア：PHASE/0-2024.01、
LAMMPS、DeePMD-kit

並列化 汎用CPUノード：最大76x8 MPI 並列
GPUノード：最大8GPU並列

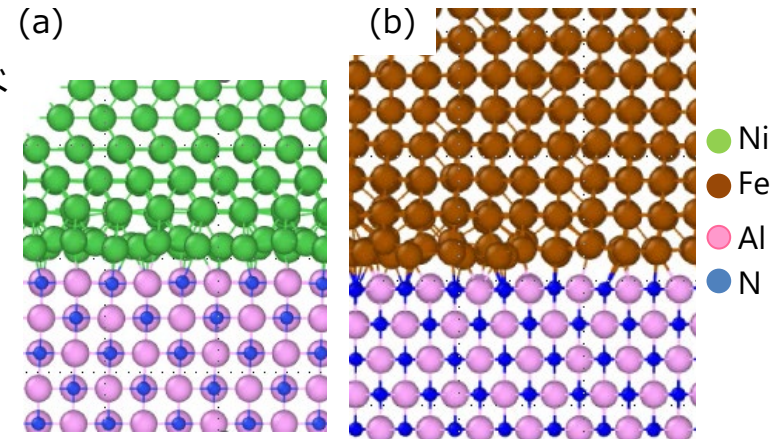


図 AlN/金属界面の反応計算

(a) 第一原理分子動力学計算のスナップショット

(b) LAMMPSによる計算スナップショット