

Machine learning potential for predicting atomic structures of impurity-segregated grain boundaries in Al_2O_3

名古屋大学大学院工学研究科 物質科学専攻 横井達矢

目的 Al_2O_3 粒界偏析の原子構造を予測する機械学習分子シミュレーションの構築

内容 Al_2O_3 粒界を対象とした機械学習原子間ポテンシャルを格子欠陥を含む学習データを第一原理計算により収集した。

結果 点欠陥や表面、粒界を対象として多数の第一原理計算を実行し、十分な量の学習データを収集することができた。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	100 時間
使用メモリ	100 GB
並列化	1ノード 並列