

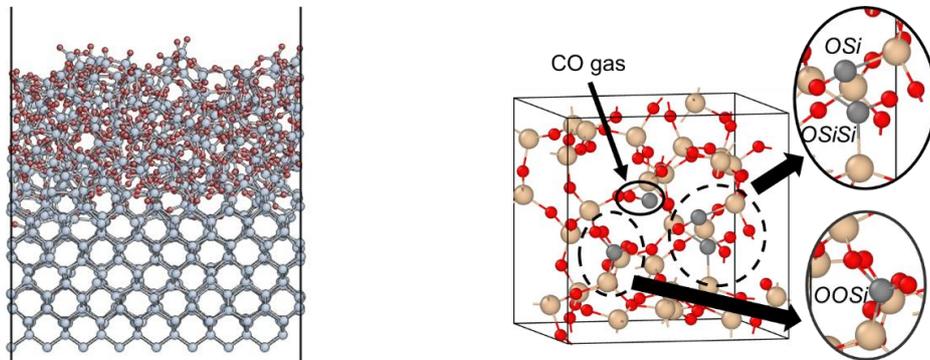
研究インターンシップ「分子動力学シミュレーションの開発・実施」

機械工学専攻 榎間大輝 講師

泉・波田野・榎間研では、鉄道、航空宇宙、自動車分野等において、様々な共同研究を実施しています。その中のシミュレーションに関する研究に加わってもらい、研究の一端を体験してもらうことを目的としています。

テーマ例1) 機械学習ポテンシャルを用いた半導体素子の分子動力学シミュレーション

機械学習ポテンシャルを活用し、複数の企業と共同で実施している半導体素子の強度評価に関わる分子動力学シミュレーションを体験してもらいます。解析にはLAMMPS (分子動力学ソフト) や Python を用いた簡単なコーディングが必要ですが、これらに関する深い知識は求めません (興味があればOK)。



シリコン結晶の酸化シミュレーション C不純物を含む絶縁膜(SiO₂)中の作成、分析

テーマ例2) 原子間ポテンシャルの開発

分子動力学の実施には原子間の相互作用を決める原子間ポテンシャルが必要となります。研究室では長年、原子間ポテンシャル作成手法の研究を行っており、特に近年は機械学習を取り入れた原子間ポテンシャル開発の効率化に注目しています。原子間ポテンシャルの作成やその手法開発の一部を体験してもらいます。テーマ1)同様、LAMMPS や python によるコーディングが必要で、テーマ1よりはややアドバンスドなテーマです。

