

出國報告（出國類別：開會）

先進材料國際會議暨
第11屆先進技術材料國際會議

服務機關：國立臺灣科學教育館

姓名職稱：蘇萬生/助理教授級編輯

派赴國家/地區：Suntec Singapore Convention & Exhibition Centre, Singapore

出國期間：112年6月25日至112年6月30日

報告日期：112年9月27日

摘要

先進技術材料國際會議(ICMAT)是自2001年開始舉辦，此後每兩年舉辦一次。從大會歷年數據庫得知，大會的前10場會議總共吸引了超過2萬5千名與會者，其中包括28名諾貝爾獎獲得者和數百名傑出會議演講人(plenary speakers)和主講人(keynote speakers)，此外還有數千名邀請演講人。ICMAT2023是一跨學科研究成果的科學平台，亦提供與會者了解材料科學未來的平台，並為專家學者們提供了分享專業知識、交流技術資訊和與建立合作聯繫的機會。

目次

壹、目的.....	1
貳、過程.....	1
參、與會心得與建議.....	1

壹、目的

此行目的為參加會議並發表 1 篇口頭會議論文，論文題目：A machine learning carbon potential constructed and its applications.

貳、過程

這次在會議口頭發表了 1 篇論文題目 A machine learning carbon potential constructed and its applications。以下為活動日程紀要；(一)6月25日：從台北桃園機場搭機前往新加坡樟宜國際機場。此行主要目的為參加先進材料國際會議暨第11屆先進技術材料國際會議。(二)6月26日：參加會議。(三)6月27日：參加會議。(四)6月28日：參加會議。(五)6月29日：參加會議。(六)6月30日：搭機返台，抵達桃園，結束整個會議行程。

發表論文摘要如下：

Ab initio molecular dynamics (AIMD) based on density functional theory (DFT) has obvious advantages in accurately describing the energy, force and dynamic processes of the system, but is time-intensive. In contrast, traditional empirical potential calculations are faster but less accurate than those of AIMD. The advent of deep neural networks for machine learning enables a combination of computational efficiency and precision. We carry out AIMD simulations via VASP software with 13 crystalline and two liquid structures under different temperatures. Deep potential, smooth edition (DeepPot-SE) is used to train the carbon potential, which is implemented in the DeePMD-kit package. This machine learning potential has strong expandability and can be used to explore C₆₀ and carbon nanotube structures to be used as a precursor in formatting paracrystalline diamonds in high-pressure high-temperature conditions (HPHT). Our results indicated that the computational efficiency has been improved by an order of magnitude compared with the GAP20 potential. These findings present significant progress in the application of carbon machine learning potentials.

電子化會議論文摘要集

https://icmat2023.mrs.org.sg/ICMAT_PROGRAM_GUIDE/program_guide.asp

參、與會心得與建議

本次會議為期五天，論壇發表內容包含各類材料相關主題。我的口頭報告被安排在第一天發表，屬於「使用機器學習和深度學習進行材料設計和性能預測」方面議題；一些與會學者會後對我的「碳學習勢」也感興趣，表達希望能合作交流。而在後續的會議裡，除了參與機器學習相關研究主題外，也聽取一些超導相關材料的報告。

在這次的會議中，也聽取中研院應科中心包淳偉老師的博士後 Svetozar NAJMAN 與成功大學工程科學系游濟華老師的報告，另也與包老師研究助理吳政倫先生討論了他發表的海報內容。藉此會議除能跟一些在相同領域的專家學者交流討論外，也可了解在材料科學領域的最新穎研究發展趨勢，最後感謝國科會經費補助。

