

対称性関数に基づいた機械学習による積層多形

La ポテンシャルの構築

理学系研究科物理学専攻博士 1 年 片岡佑太

日本製鉄株式会社技術開発本部先端技術研究所(9/6~10/29)

最密構造を形成する 3 次元結晶はポリタイプと呼ばれる 3 種類の積層の組み合わせからなる様々な構造をとりうる。同層数構造において、ポリタイプ構造によってバンドギャップや体積のような物性値が異なることが知られている [1][2]。そのため用途に合った物性値を持つポリタイプを結晶 成長により作することは工学的に有益である。

新機能性物質の探索や結晶成長の過程を調べるためにはポリタイプの微視的機構を正確に再現するような動的シミュレーションを行う必要がある。このようなシミュレーションを行う主な方法として第一原理分子動力学法(AIMD)と呼ばれる方法が考えられてきた[3]。しかし、結晶成長は長時間のシミュレーションを要するため、計算コストの大きい AIMD では困難である。こ

これらの問題を解決するために、本研究では対称性関数を利用したニューラルネットワークを作成することで、密度汎関数法 (DFT) に基づいた第一原理計算の結果を再現するような La ポリタイプの分子動力学ポテンシャル作成を行った。ポリタイプの積層順序を写像することで hexagonality と呼ばれる量を作ることができるが、物性値と hexagonality には相関があると考えられている。今回 DFT によるエネルギーと hexagonality の相関を再現するようなニューラルネットワークポテンシャル (NNP) 構築を目指した。

【謝辞】

本インターンシップで議論をしていただいた日本製鉄株式会社技術開発本部先端研究所の皆様に深く御礼申し上げます。また東北大学、博士 1 年大金真也さんには共同で研究を行なっていただきましたので感謝申し上げます。最後にインターンの機会を作ってくくださった CCMS にも感謝いたします。

[1] 森口 晃治, 岡田 信宏, 海藤 宏志, 岸田 豊, 楠一 彦, 関 和明, 亀井 一人, 新日鉄住金技報 707, 58 (2017).

[2]宮川 拓, 東北大学修士論文.

[3]R. Car and M. Parinello, Phys. Rev. Lett. 55 ,2471
(1985).