

2023 年度年次報告書
力学機能のナノエンジニアリング
2021 年度採択研究代表者

松中 大介

信州大学 学術研究院
教授

第一原理機械学習手法によるナノ異材界面の力学特性の解明

研究成果の概要

本研究では、構成材料中とは異なる異種原子間の相互作用場が生じる異材界面に適用可能な原子間ポテンシャルを、機械学習技術によって開発する手法を確立し、ナノスケールでの界面の力学挙動を解明することを目指している。

昨年度開発した Si/Ge 界面に対する人工ニューラルネットワーク(ANN)原子間ポテンシャルを用いて、Si/Ge(110)整合界面上のき裂に対してモード 1 負荷の下での解析を進め、原子 1 個分のき裂進展を考える離散破壊力学のエネルギー解放率が、き裂長さによらずほぼ一定の値を示すことを明らかにした。これは、先端の応力場が複雑な界面き裂の場合であっても、破壊力学的な評価の有効性を支持する結果と考えられる。

また、より複雑な界面構造での精度向上のためには訓練データが不足している特徴量空間の領域に対応する追加データが必要であり、昨年度から開発を行っている記述子から原子座標を復元するモデル生成器ニューラルネットワークを検討した。本年度は、目標とする記述子を持たせる原子以外の原子配列に対する制限と計算モデル中の原子の入れ替えの対称性を考慮した改善を行い、計算モデルの復元性を向上させることができた。

さらに、結晶の原子配列が乱れて、エネルギー変化の大きい構造とエネルギー変化の小さい弾性変形のデータがある場合、後者は損失関数の中で埋没して弾性定数に対する学習が進行しないという問題に対して、ANN 原子間ポテンシャル学習において、損失関数にデータごとの重みを与えることにより、弾性定数を安定的に学習できる技術を開発した。