

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

2022 年度
年次報告書

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、機械学習を援用して第一原理計算の精度を持つ異材界面系の原子間ポテンシャルを開発するスキームを確立する。本研究の機械学習ポテンシャルにおいては、各原子まわりの局所的な原子配列の情報を適切な記述子により抽出し、表現能力の高い数理モデルである人工ニューラルネットワーク(ANN)に受け渡す方法を採用している。この方法は異材界面のように化学結合の状態が不均質な場合でも精度が高い原子間ポテンシャルを実現しうる能力を原理的に持っているが、対象とする系に対して適切な記述子をいかに選定するか、学習時に十分なリファレンスデータが与えられているかが課題となってくる。昨年度考案した原子エネルギーのばらつきによるデータ密度不足の判定に対して、目標とする記述子から原子座標を復元するモデル生成ニューラルネットワークの作成を検討し、追加データの計算モデルを得る手法を開発した。また、昨年度作成した Al/Cu 界面の ANN 原子間ポテンシャルについて、界面および界面近傍の原子面での劈開に対する精度について検証し、さらに d-band center 理論を用いて界面相互作用の界面ひずみ依存性に関して電子論的考察を行なった。2022 年度はこれまで Al/Cu 界面に対して開発した記述子やリファレンスデータに関する方法論を共有結合性の Si/Ge 界面に対して適用して、欠陥構造および弾性定数について十分な精度を持つ ANN 原子間ポテンシャルの作成に成功した。作成した Si/Ge 界面の ANN 原子間ポテンシャルを用いて 90 万原子のモデルで解析を実行し、界面き裂の応力場やき裂進展の臨界応力を解明した。