

格子欠陥特性の理解に向けた機械学習ポテンシャルの構築とその応用

背景

結晶粒界

- 多結晶内部の材料界面
- 特異な原子構造
- マクロな材料特性に寄与

原子構造 原子・電子
材料特性 レベルの理解

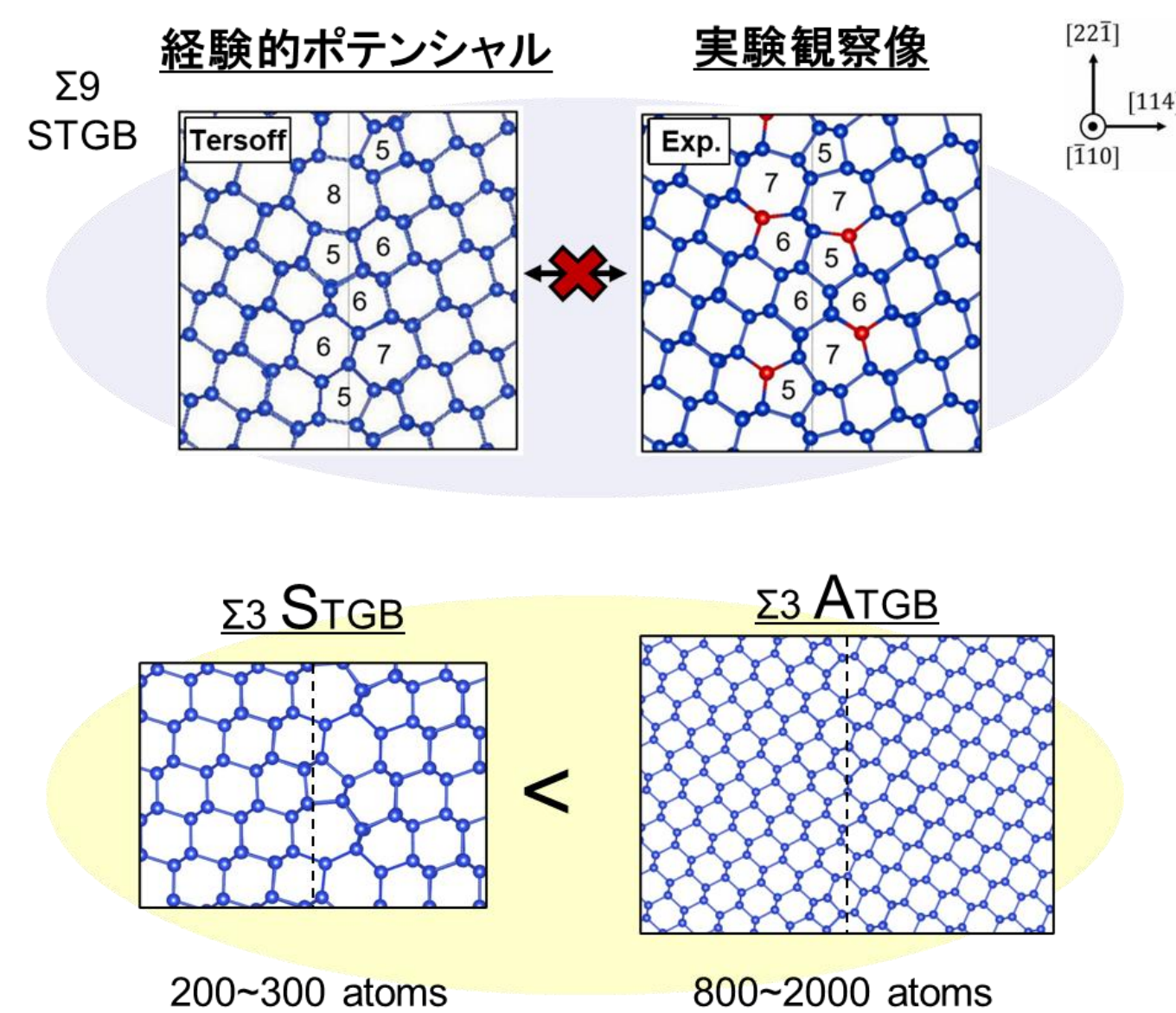
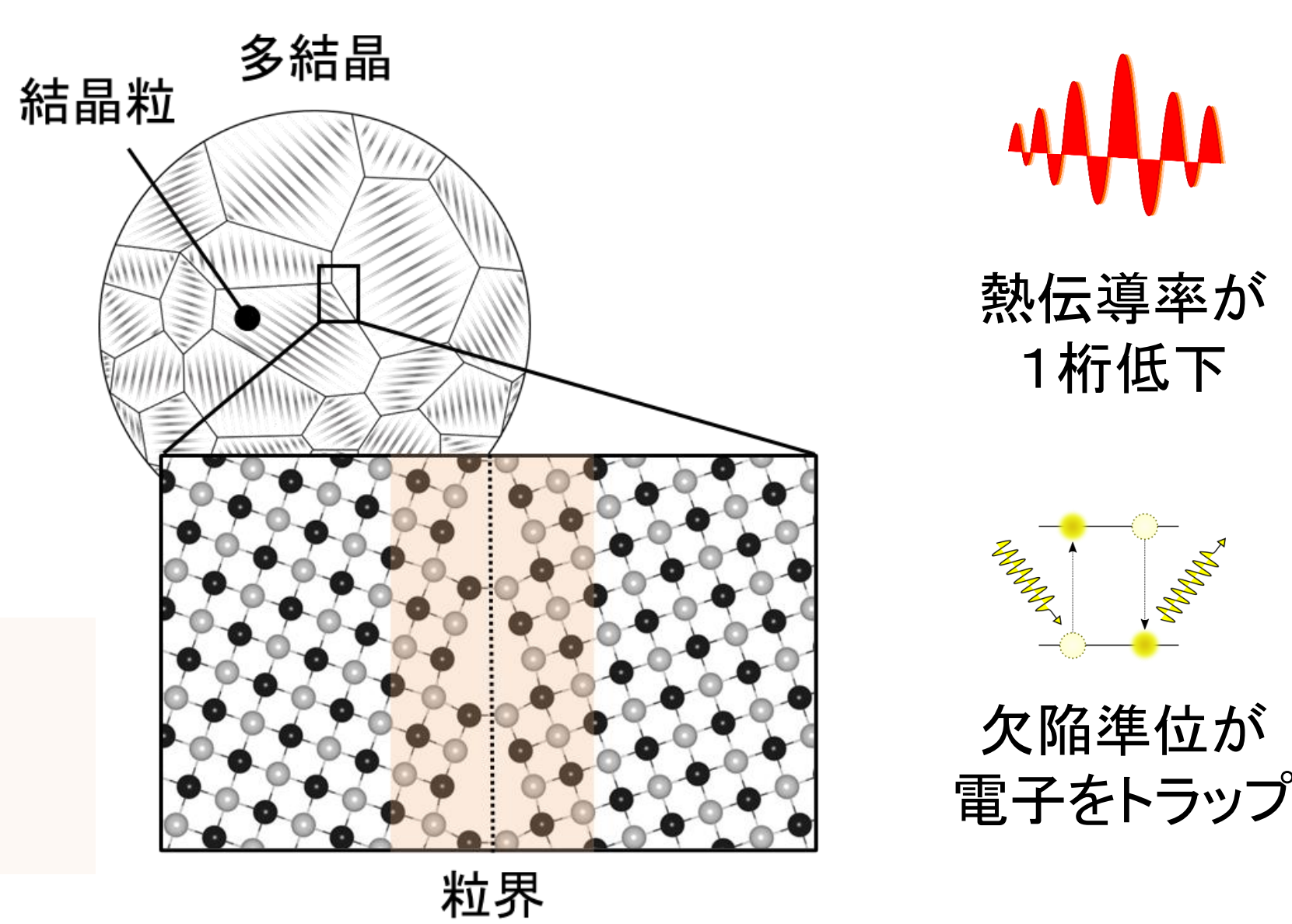
従来の理論解析手法

経験的原子間ポテンシャル

- 高速 ($\propto O(N)$)
- 単純な解析関数
- 参照構造が限定的

DFT計算

- 高精度
- 格子欠陥にも適用可
- 高コスト ($\propto O(N^3)$)



計算精度と計算コストを両立できていない

研究目的

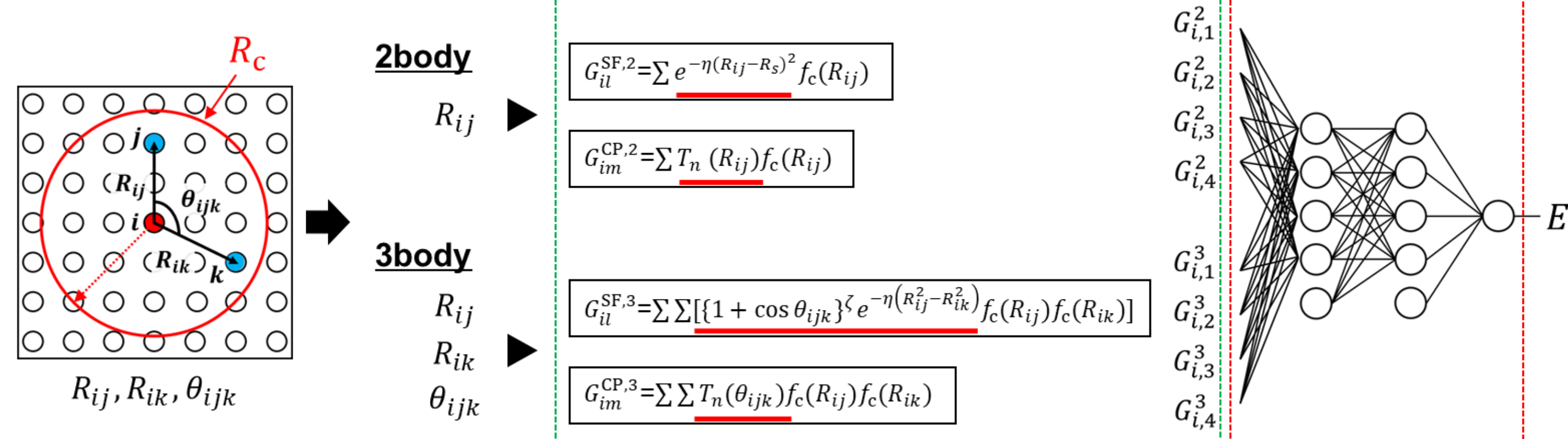
DFTデータを学習した機械学習モデル

- シミュレーションの高速・高精度化
- 粒界の原子構造・特性の関係を理解

計算手法

[1]J. Behler, Int. J. Quantum Chem. **115** (2015) [2]N. Artrith et al., Phys. Rev. B **96** (2017)
[3]M. Uchida et al., Phys. Rev. Mater. **8**, 103805 (2024).

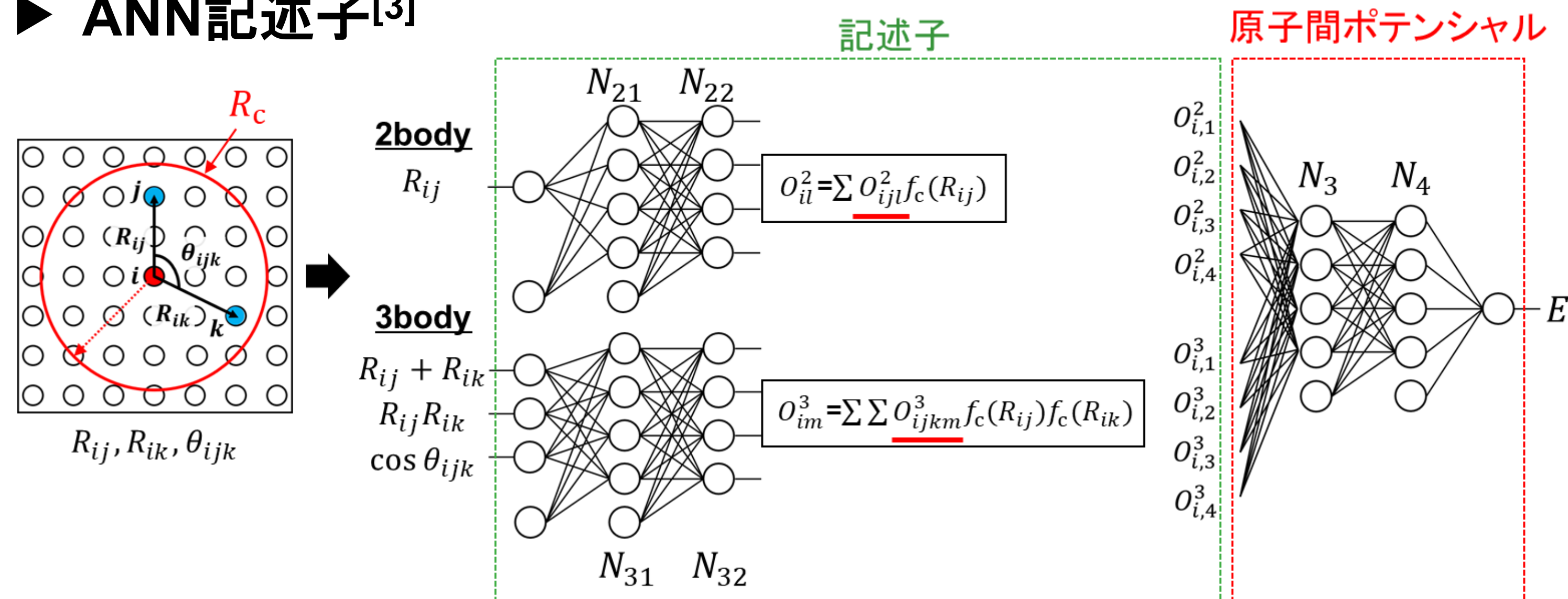
解析関数記述子



- 対称関数 G_i^{SF} [1] : ハイパーパラメータ $\eta_2, \eta_3, R_s, \lambda$ を経験的に調整

- チェビシェフ多項式 G_i^{CP} [2] : 既知の単純な解析関数

ANN記述子[3]



- 解析関数を2つのニューラルネットワークに置き換える
→記述子と原子間ポテンシャルが同時に学習される構成

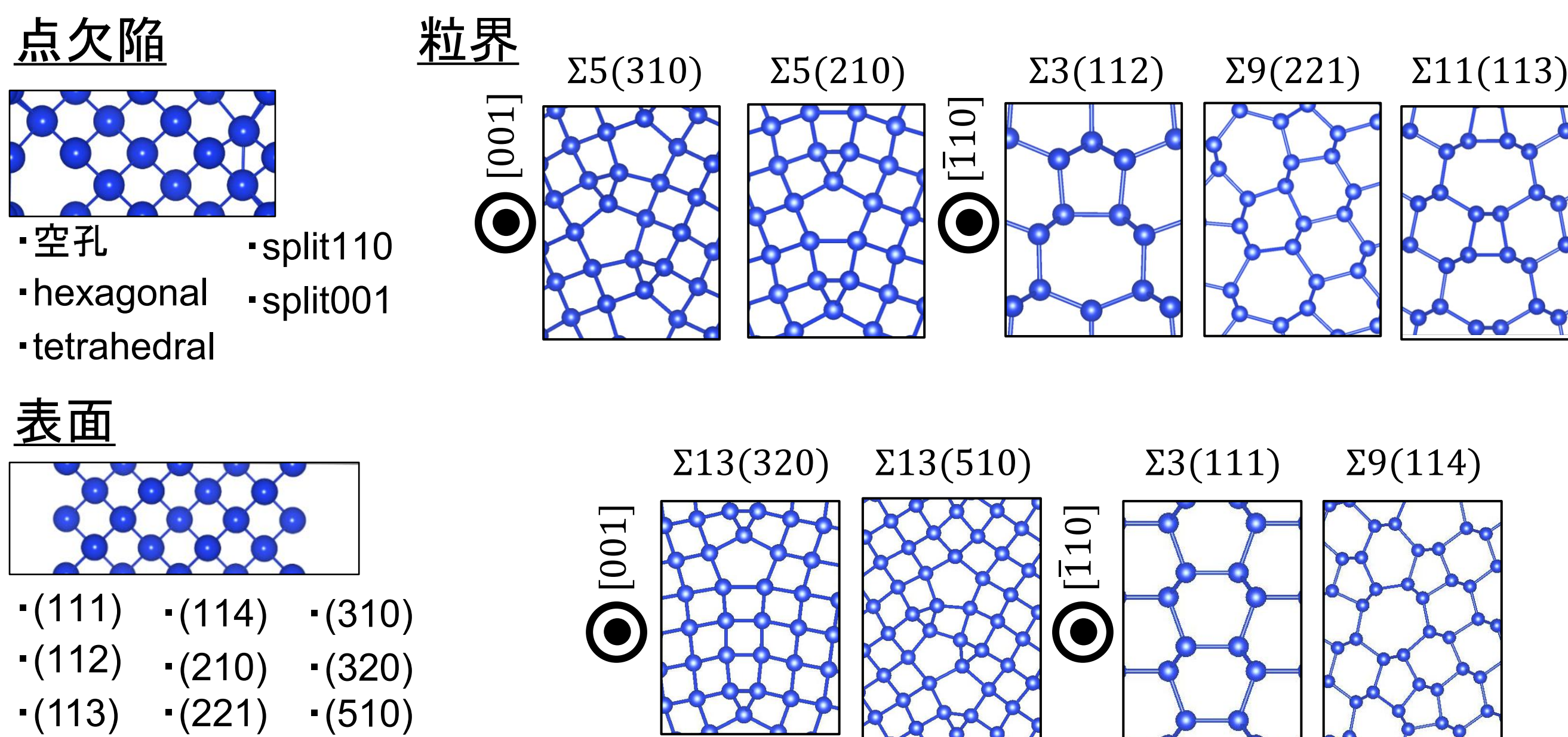
計算条件

学習データ

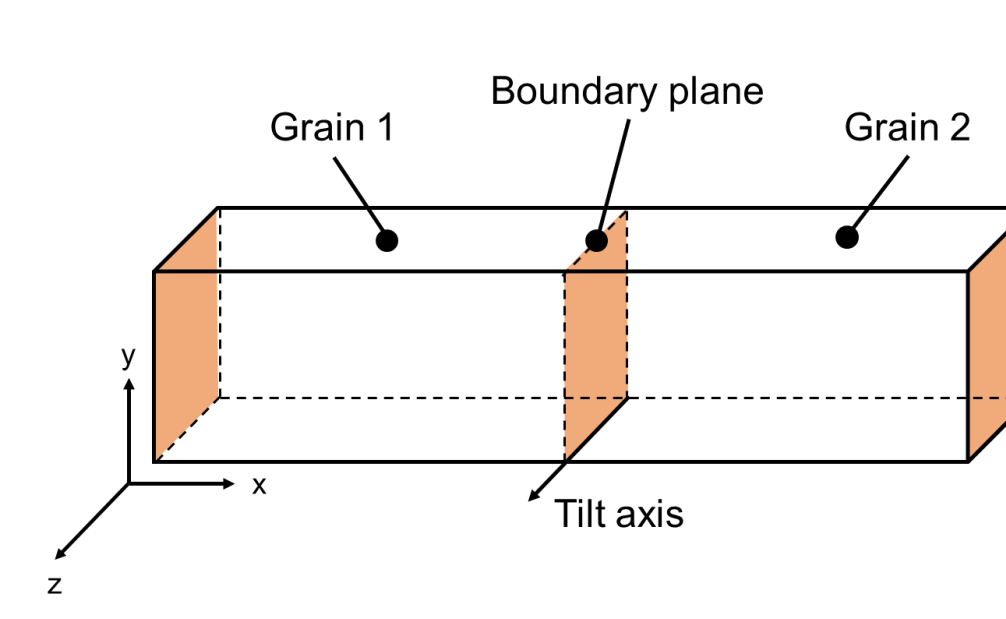
Siの格子欠陥構造
・系のエネルギー: 46400データ
・原子にかかる力: 6034635データ

DFT計算条件

- 平面波基底PAW法 (VASP)
- エネルギーカットオフ: 500 eV
- 交換相関エネルギー: GGA-PBEsol
- k点メッシュ数: $8 \times 8 \times 8$
- 価電子: 3s and 3p orbitals
- エネルギー収束条件: 10^{-6} eV



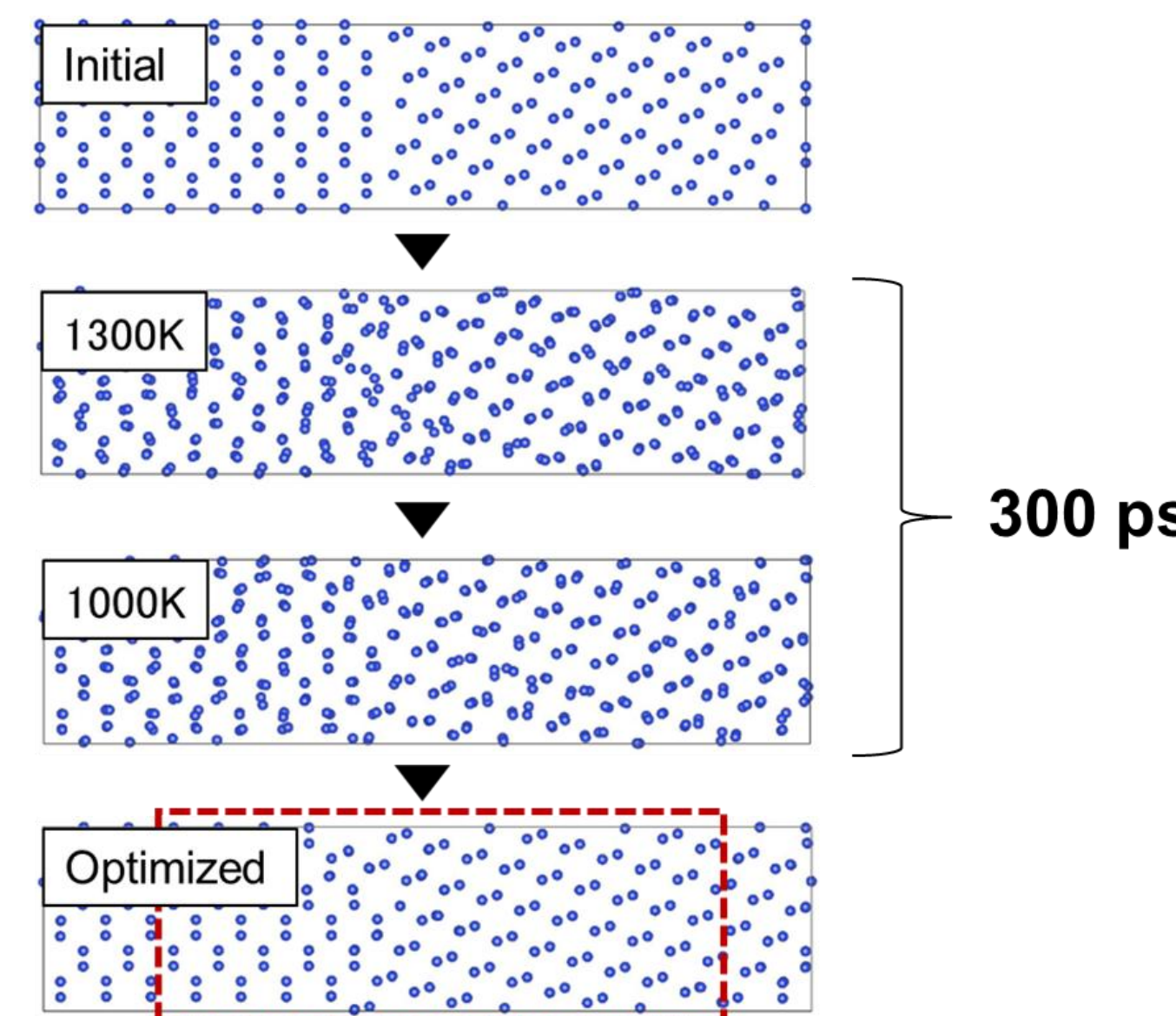
焼きなまし法



- 3次元周期的境界条件 (シミュレーションセル中に2つの粒界)
- 粒界エネルギー γ_{GB} は次式で計算した

$$\gamma_{GB} = \frac{E_{GB} - N_{Si} \cdot \mu_{Si}}{A_{GB}} - \gamma_{Surf1} - \gamma_{Surf2}$$

N_{Si} : Si原子の数 μ_{Si} : Siの化学ポテンシャル
 A_{GB} : GBの断面積



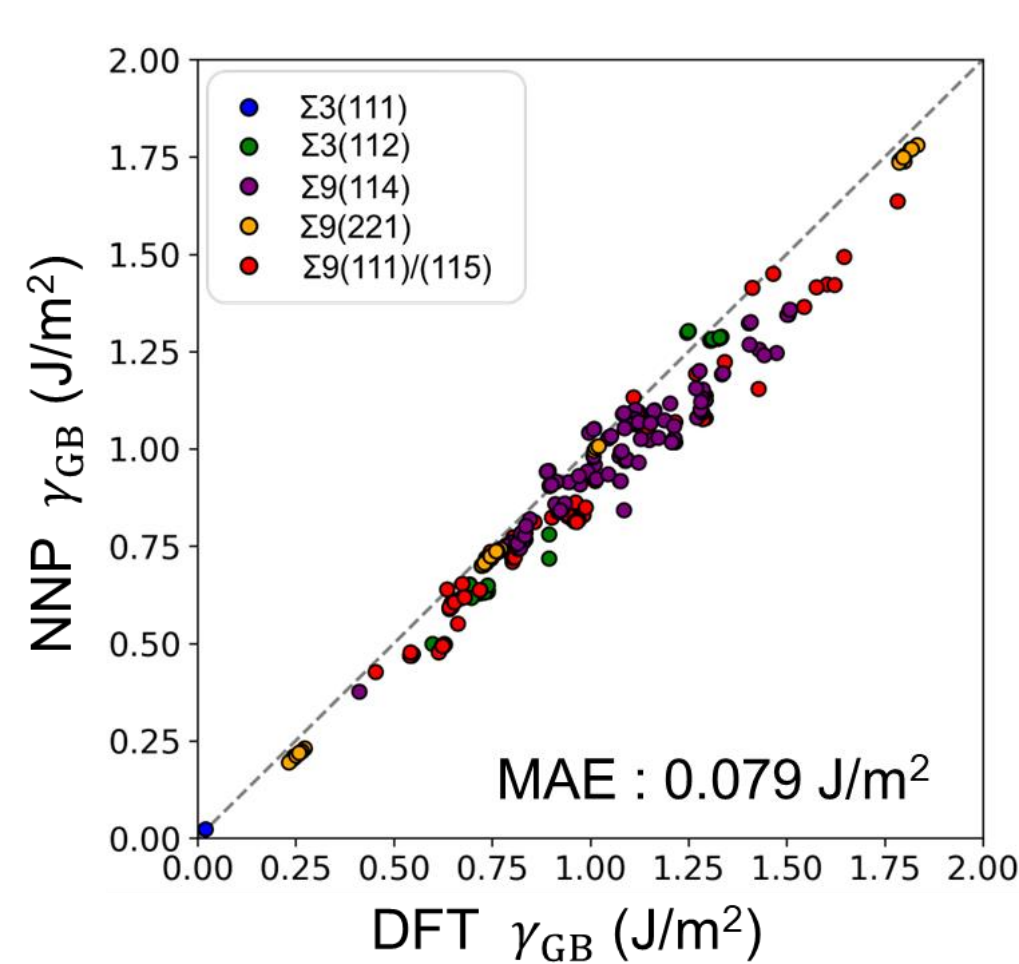
結果

[4]M. Uchida et al., Phys. Rev. Mater. **9**, 113804 (2025).

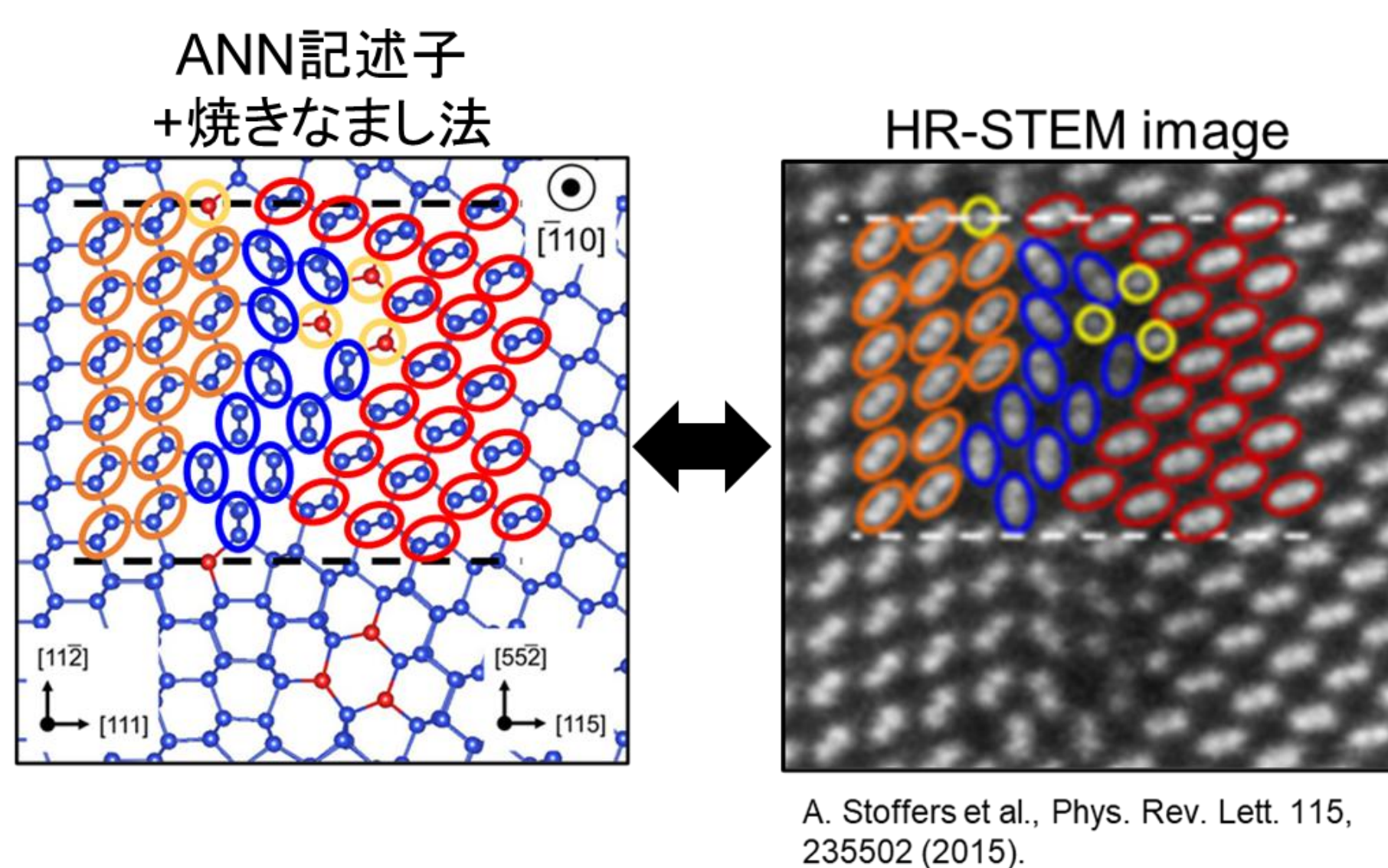
Si 非対称傾角粒界(ATGB)への適用

DFT計算・実験観察像との比較・検証

予測値とDFT計算値における γ_{GB} の相関



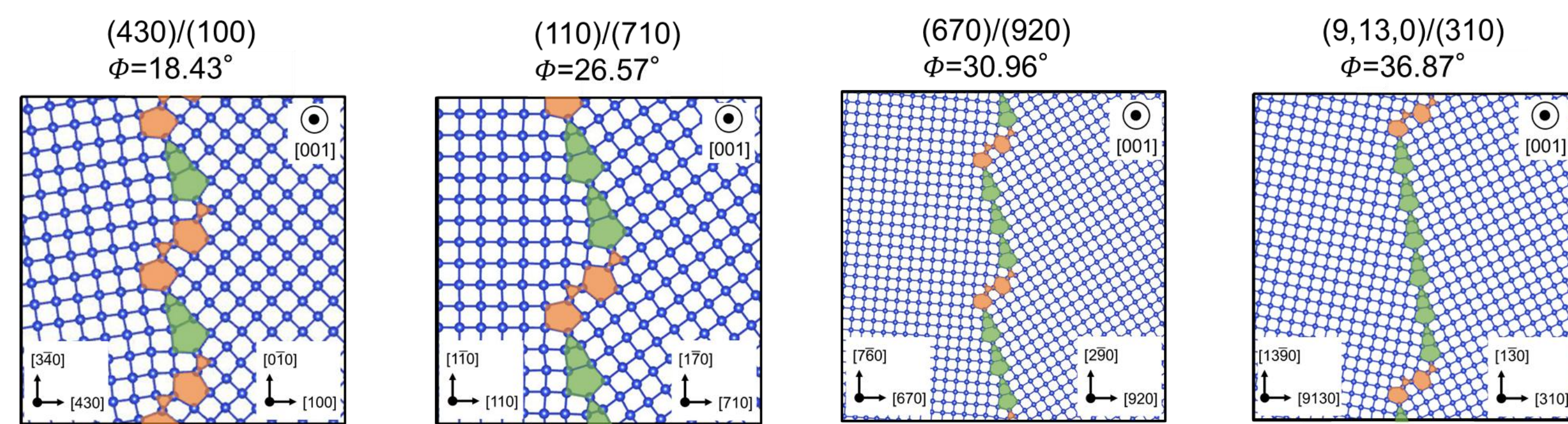
$\Sigma 9(111) \parallel (115) [\bar{1}10]$ ATGB



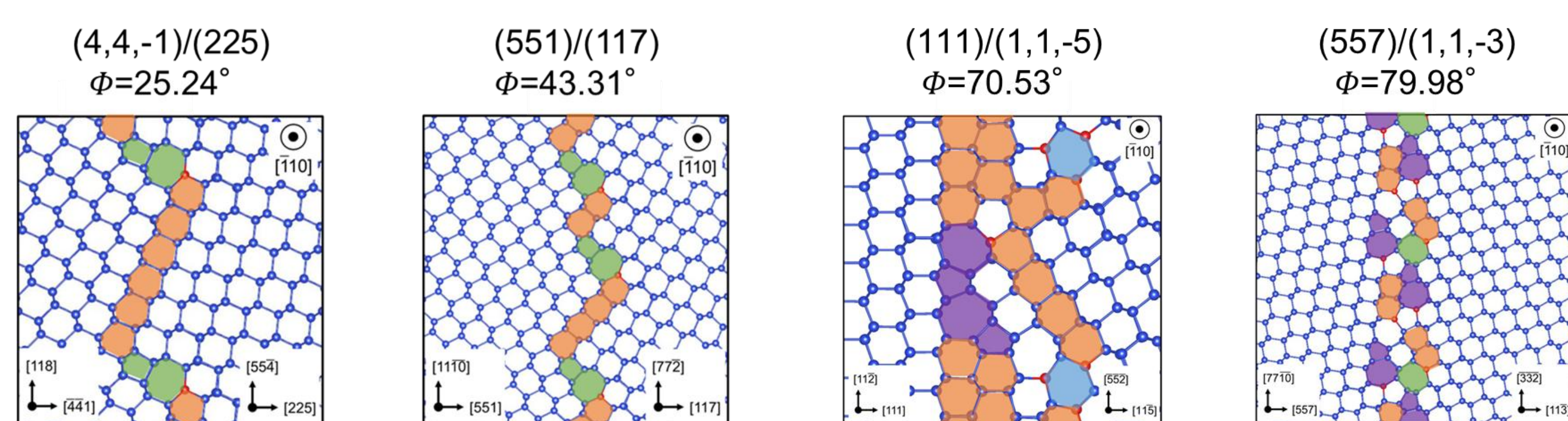
- 予測値とDFT計算値の良好な一致
- 最も γ_{GB} が低い原子構造は実験観察像とも対応

$\Sigma 5, \Sigma 3$ 非対称傾角粒界の原子構造

$\Sigma 5$ ATGB → 対称粒界の2つの構造ユニットの組み合わせで構成



$\Sigma 3$ ATGB → 傾斜角の変化に伴って構造ユニットが変化



$$0^\circ \leq \phi \leq 64.76^\circ \quad \text{+} \quad 70.53^\circ \leq \phi \leq 90^\circ \quad \text{+} \quad \alpha$$

DFT計算データを学習した機械学習ポテンシャルを構築・Siに適用

・予測結果はDFT計算値および実験観察像と良好に一致

・Si非対称傾角粒界の原子構造を決定→傾斜角に応じた構造ユニットの変化

謝辞

・JSPS科研費基盤C、機械学習記述子・原子間ポテンシャルによる一般粒界-格子欠陥相互作用の学理構築 (JP23K04381)
・JSPS科研費基盤B、転位・粒界制御によるバックキャストの材料設計のための電子・熱伝導支配因子の解明 (JP23K26365)
・JST BOOST、国家戦略分野の若手研究者及び博士後期課程学生の育成事業 (JPMJBS2422)