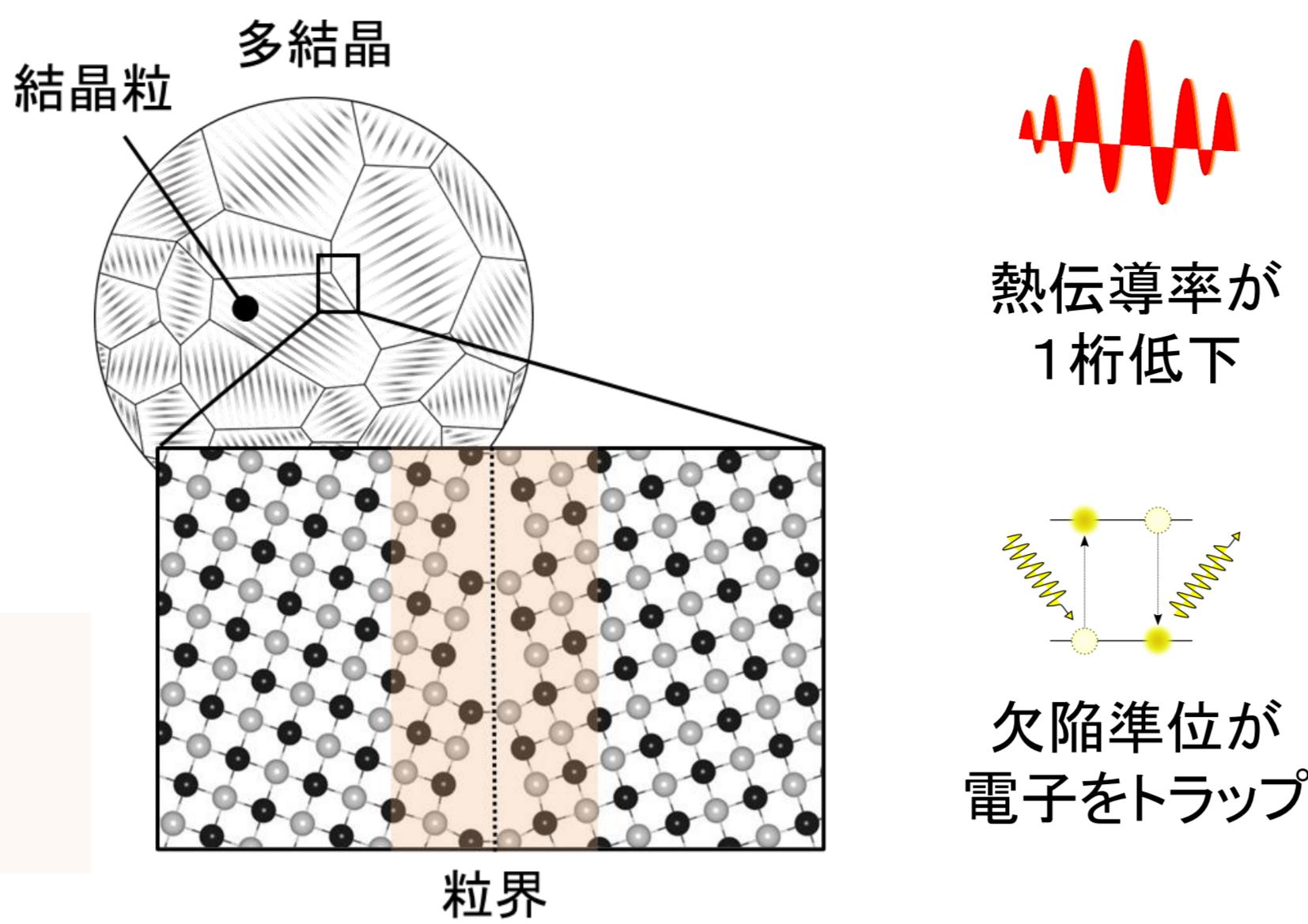


格子欠陥特性の理解に向けた機械学習ボテンシャルの構築とその応用

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



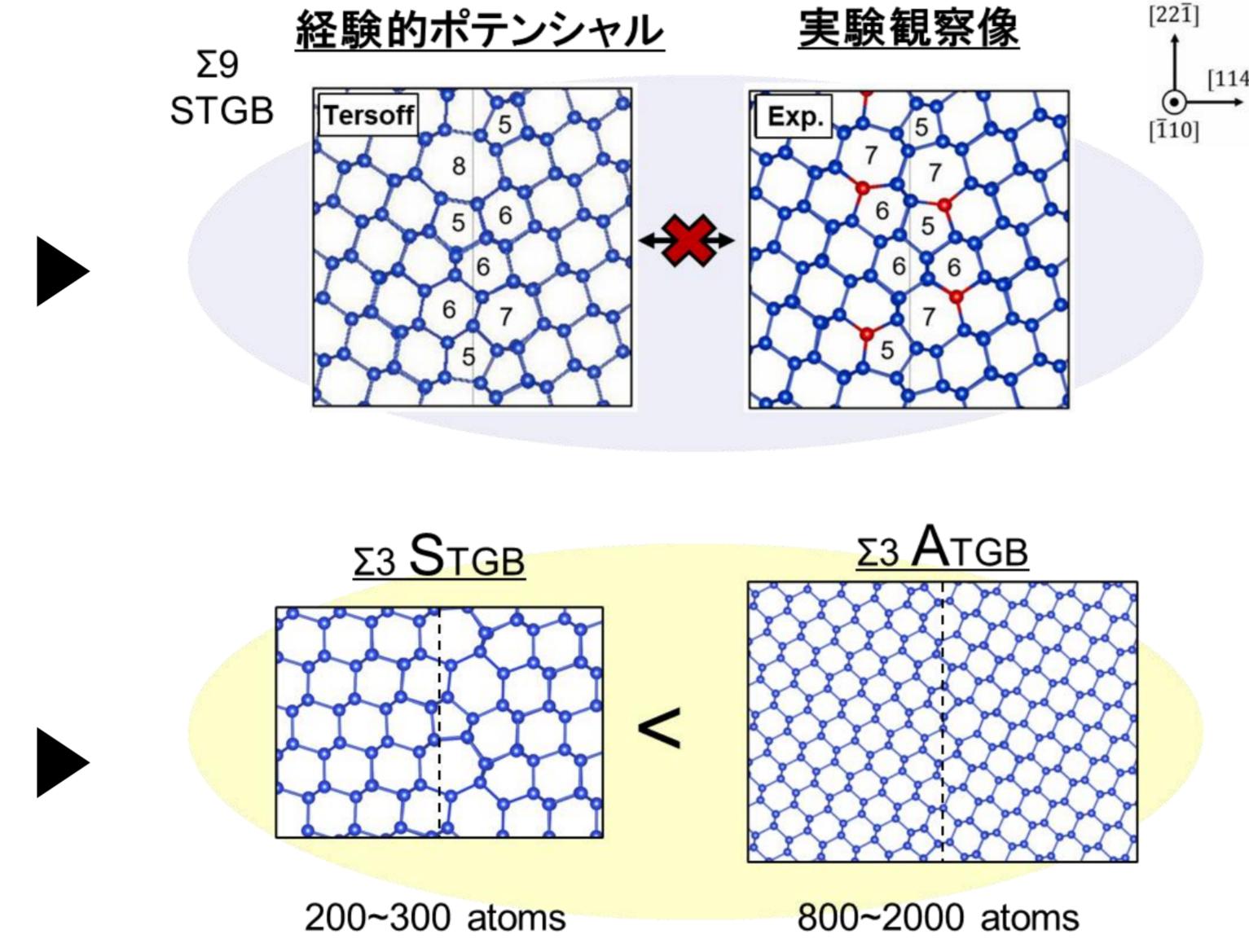
従来の理論解析手法

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

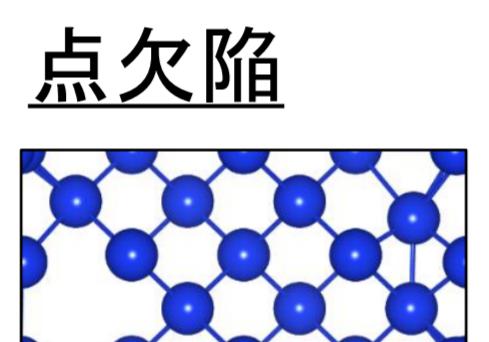
DFTデータを学習した機械学習モデル

- 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

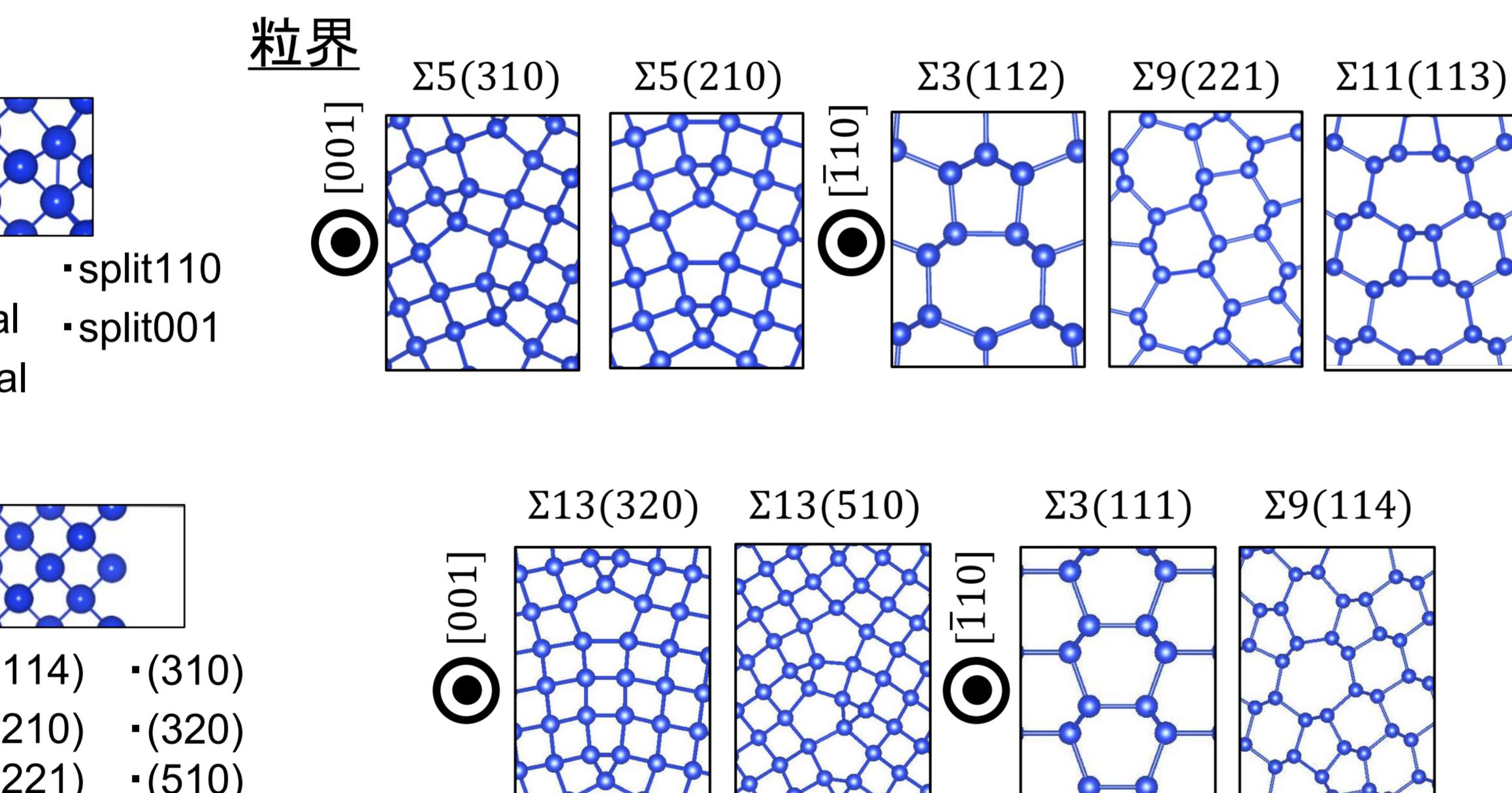
計算条件

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



粒界

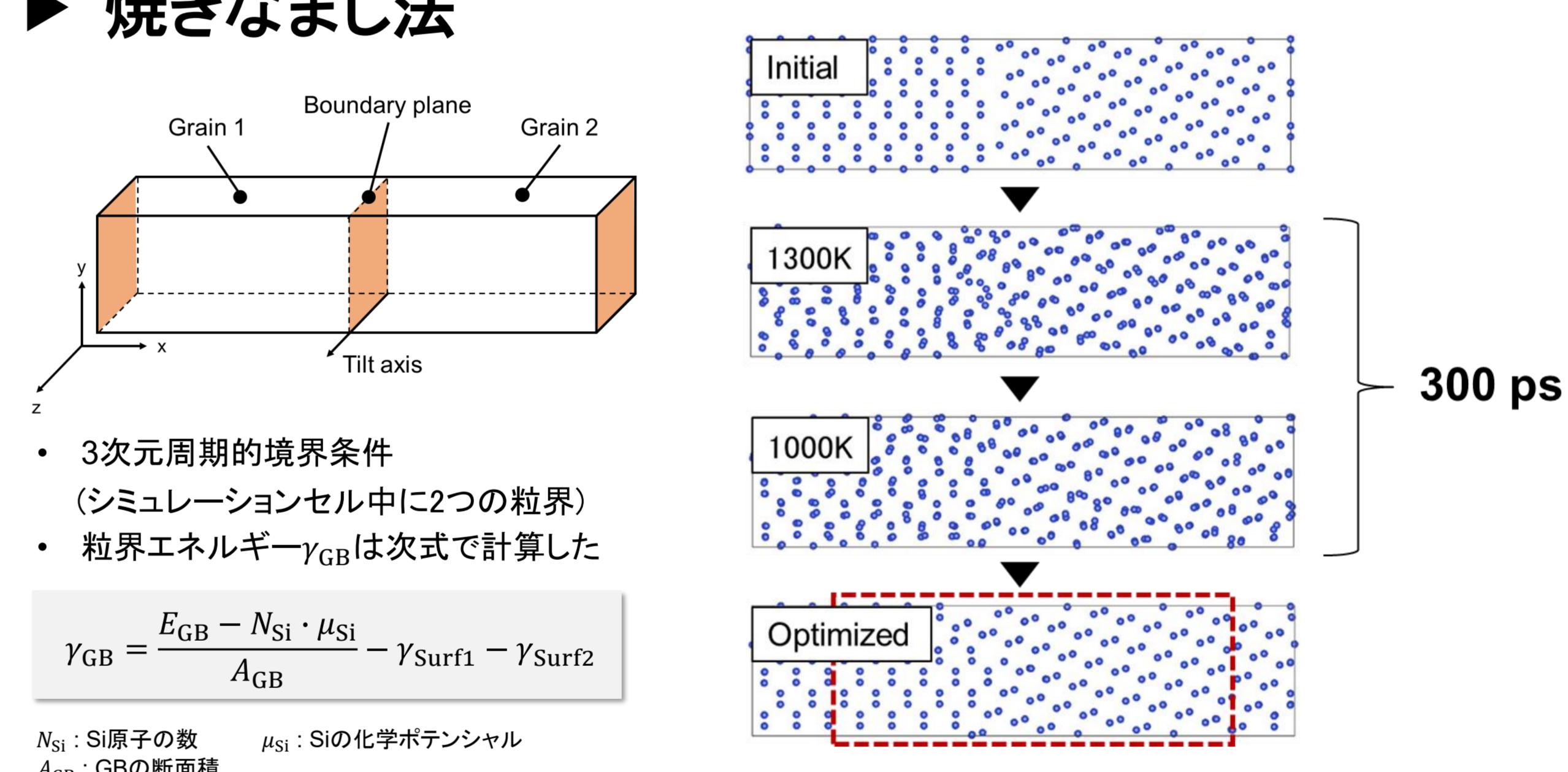


DFT計算条件

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



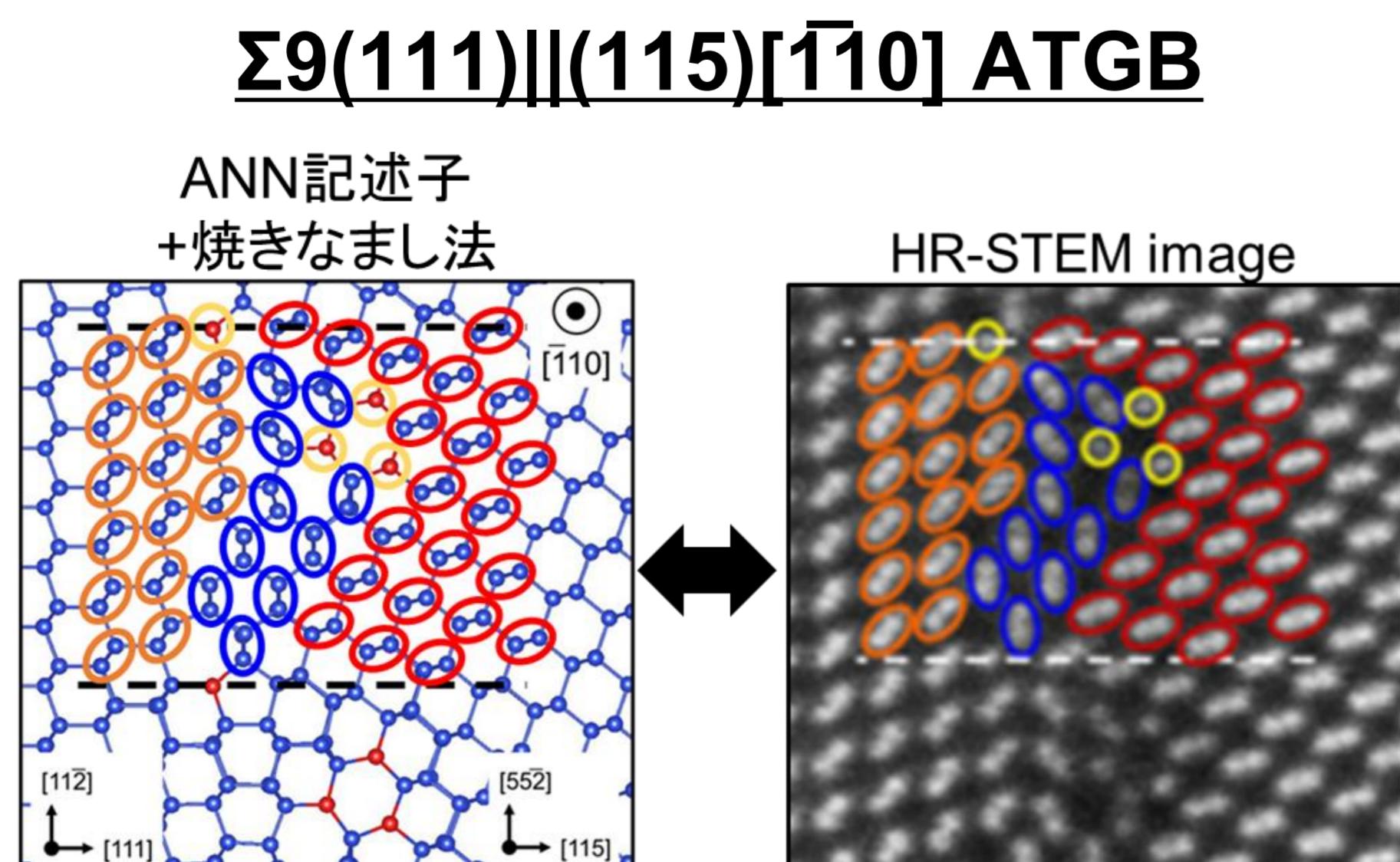
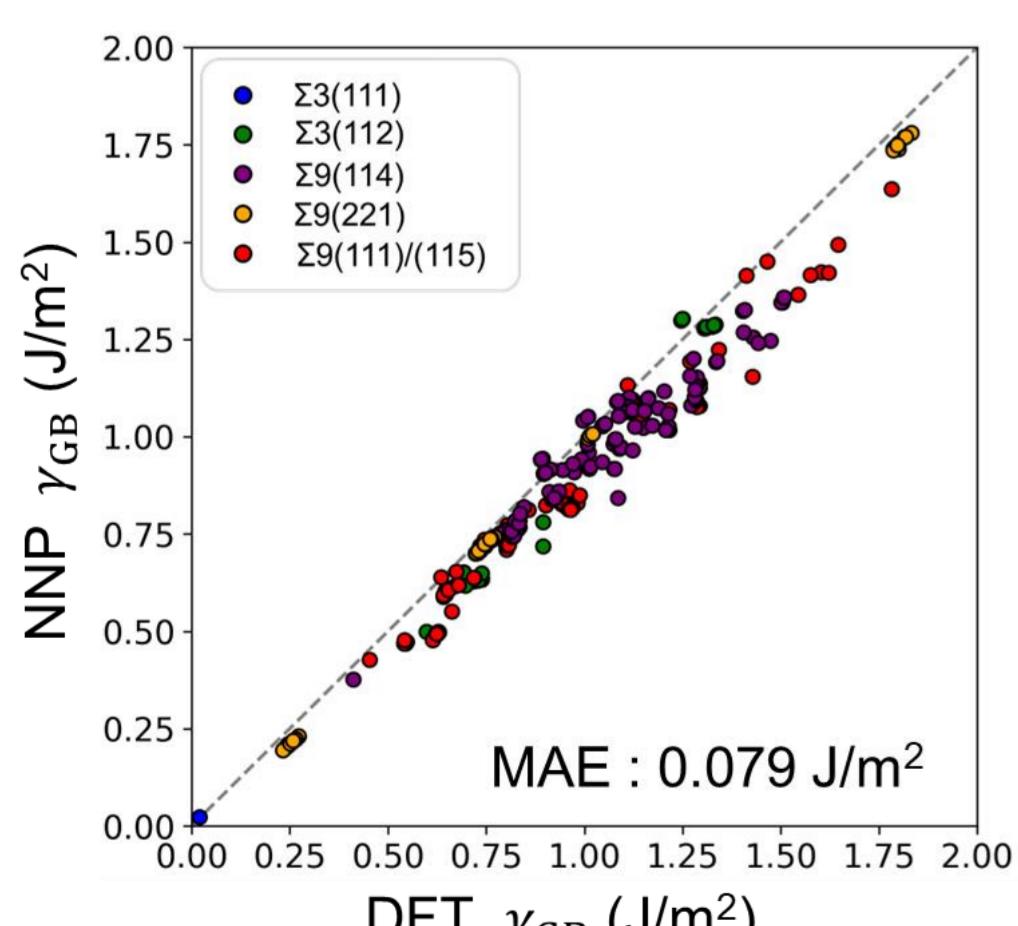
結果

[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

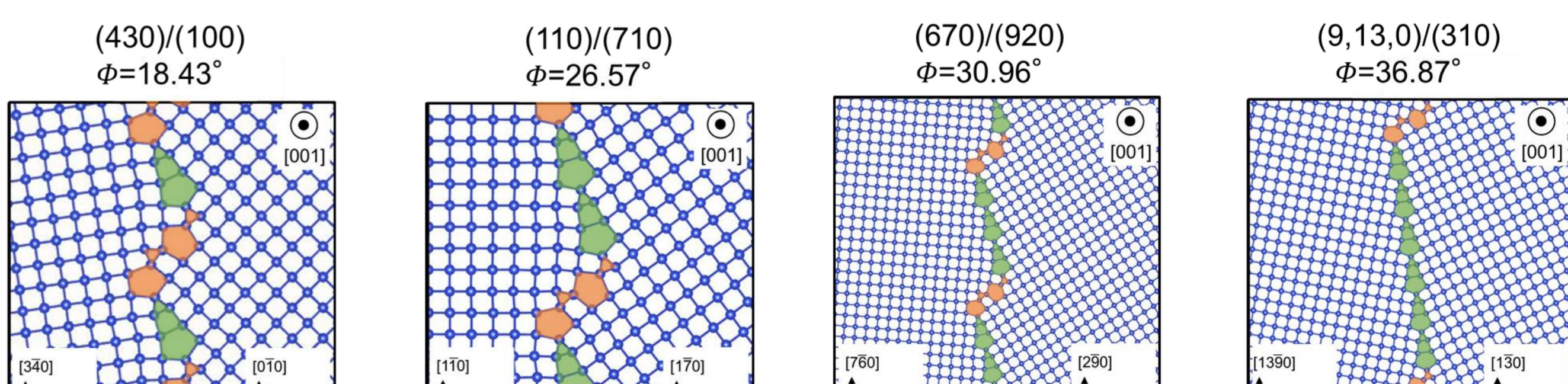
予測値とDFT計算値における γ_{GB} の相関



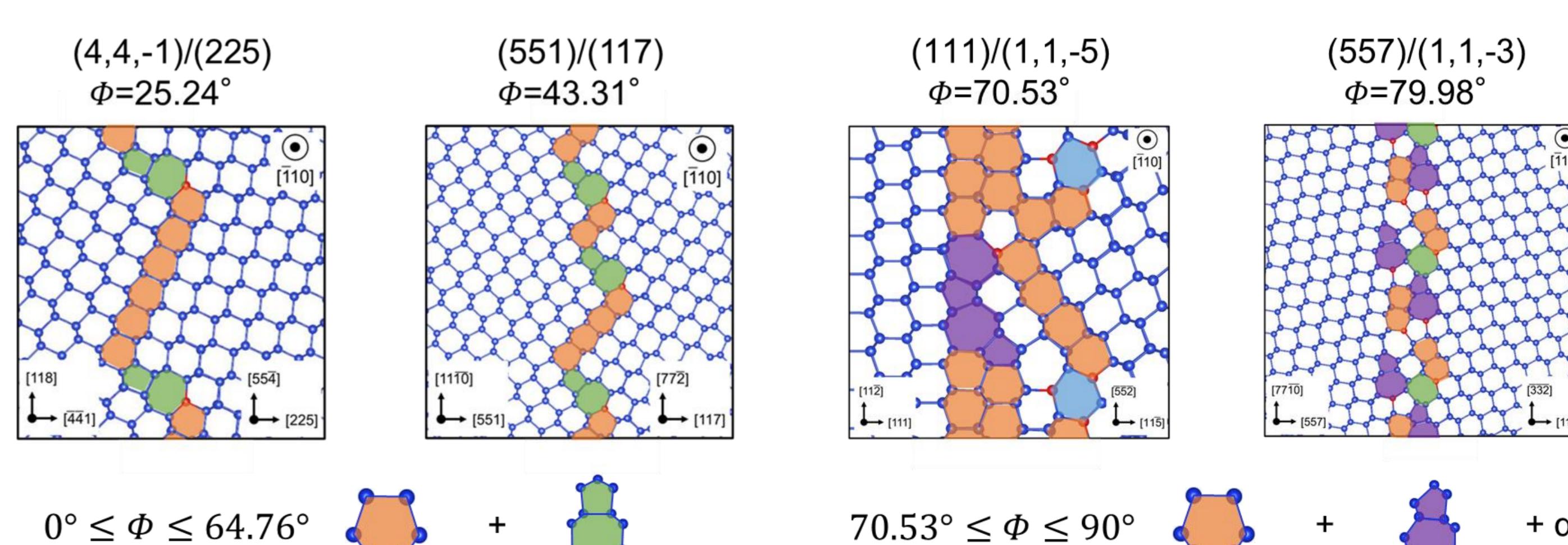
- 予測値とDFT計算値の良好な一致
- 最も γ_{GB} が低い原子構造は実験観察像とも対応

$\Sigma 5, \Sigma 3$ 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



DFT計算データを学習した機械学習ボテンシャルを構築・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的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)