

機械学習ポテンシャルで辿る拡散経路の全探索と物性解析

(産業技術総合研究所) 安藤 康伸

yasunobu.ando@aist.go.jp

第一原理分子動力学計算は、電子を露わに扱うことから物質の種類・形状によらず、また化学反応なども経験的なパラメータをもちいることなく取り扱うことができる極めて強力なツールである。一方で、密度汎関数法に基づく第一原理計算は計算コストが高く、アモルファスや液体などの大規模な不規則系に適用する際には一般的に扱えるスケールに限られるという問題があった。このような背景のもと近年、第一原理計算の結果を基にして経験的ポテンシャルを作成する、いわゆる機械学習ポテンシャルが盛んに研究されている。最も代表的なものが2007年の Behler, Parrinello のニューラルネットワーク

ポテンシャルである[1]。Behler-Parrinello の方法によって、小規模な第一原理計算の結果を学習することで大規模な分子動力学計算を低コストで実行することが可能となり、世界的に注目を集めることとなった。

本講演では、機械学習ポテンシャルの構成方法と、講演者らの研究成果であるニューラルネットワークポテンシャルを用いたアモルファス内部の粒子拡散経路の網羅探索法[2]、小規模計算結果から大規模系へのポテンシャルの移植に関する最近の研究成果[2,3]、アモルファス構造に関する乱れ具合の制御や拡散機能の研究[4,5,6]について報告する。

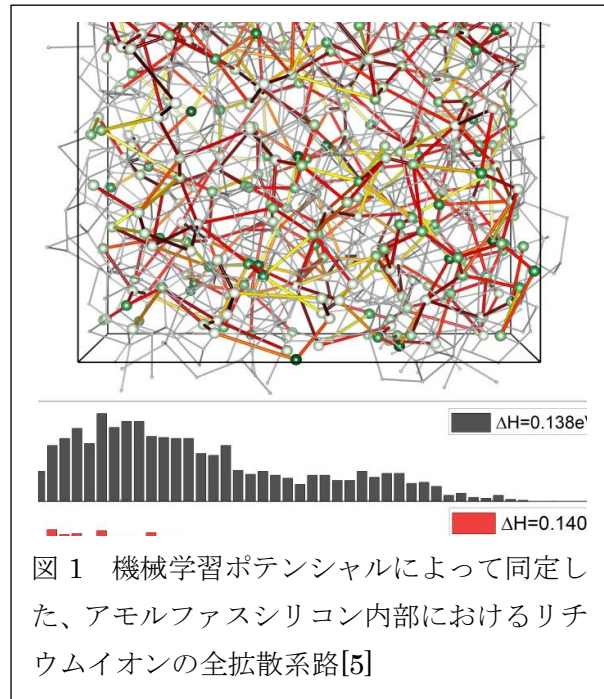


図1 機械学習ポテンシャルによって同定した、アモルファスシリコン内部におけるリチウムイオンの全拡散系路[5]

[1] J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. **98**, 146401 (2007).

[2] W. Li, Y. Ando, and S. Watanabe, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 104004 (2017).

[3] W. Li, Y. Ando, E. Minamitani, and S. Watanabe, J. Chem. Phys. **147**, 214106 (2017).

[4] W. Li and Y. Ando, J. Chem. Phys. **151**, 114101 (2019).

[5] W. Li and Y. Ando, Phys. Rev. Mater. **4**, 045602 (2020).

[6] S. Watanabe, W. Li, W. Jeong, D. Lee, K. Shimizu, E. Mimanitani, Y. Ando, and S. Han, J. Phys. Energy **3**, 012003 (2021).