

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	笠松秀輔
研究機関名	山形大学
所属部署名	学術研究院(理学部主担当)
役職名	准教授
研究課題名	不規則材料系のマテリアルズインフォマティクスへの展開
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

固溶体の第一原理基統計熱力学計算フレームワーク abICS のこれまでの開発成果をまとめて、abICS v2.1.0 としてリリースした。このフレームワークでは、スーパーコンピュータを活用した多数の原子配置に対する計算データ生成、これを再現する機械学習モデルの訓練、機械学習モデルを用いた高速統計熱力学計算の3つのステップで構成される能動学習サイクルを簡便に実施できる。Python ライブラリのレポジトリである PyPI にも登録し、Python と MPI を用いた並列計算が設定された計算機環境では、コマンド1つ(pip3 install abics)でインストールできるようになった。また、abICS に関するソフトウェアレビュー論文“Configuration sampling in multi-component multi-sublattice systems enabled by ab initio Configuration sampling toolkit (abICS)”を執筆し、Sci. Technol. Adv. Mater. Meth. 誌に Focus Issue Review 論文として掲載された。5 以上の元素・欠陥種、および複数の副格子から構成され、配置不規則性を有する結晶系において、第一原理基熱力学計算を初めて実現したものであり、これによって多くの機能性材料の物性予測が初めて可能になった。

以上は主に結晶格子上の配置の不規則性に対応する手法に関連する成果であるが、構造自体が不規則なアモルファス系についても計算を進めた。近年注目されている同変性グラフニューラルネットワークを用いた多元系混合ガラスの分子動力学シミュレーションも開始し、4 元系 (AgI-As₂Se₃) 超イオン伝導ガラスで 4000 原子、100 ns の計算によって実験値と定量的に一致する拡散係数を得ることに成功した。100 ns は 4 元系ガラスの第一原理ベース計算で前人未踏のシミュレーション時間である。また、平均自乗変位の時間変化を調べたところ、1 ns 程度のシミュレーションでは収束が不十分で拡散係数を 2 倍程度過大評価してしまうことが分かり、定量的な計算のためにこのような長時間計算が必要となることが分かった。計算データからガラス中に埋め込まれた不均一な伝導経路を見出しており、超イオン伝導性の起源解明を進めている。