

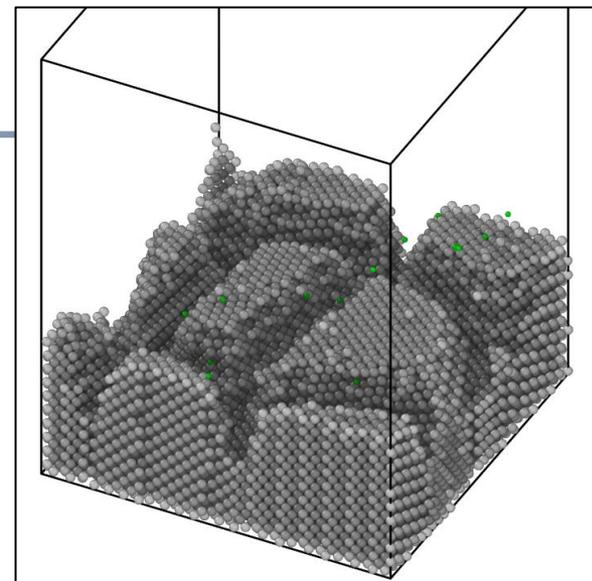
研究テーマ紹介

深層学習技術を用いた  
分子動力学シミュレータの開発

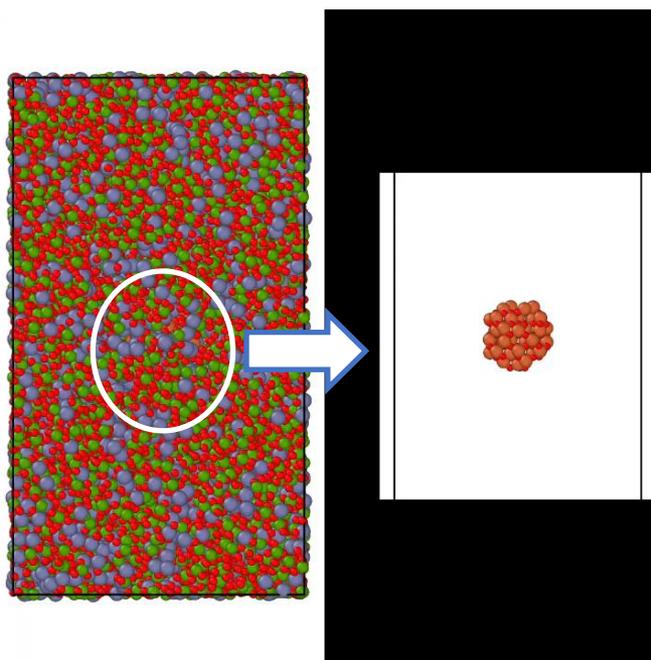


# 分子動力学

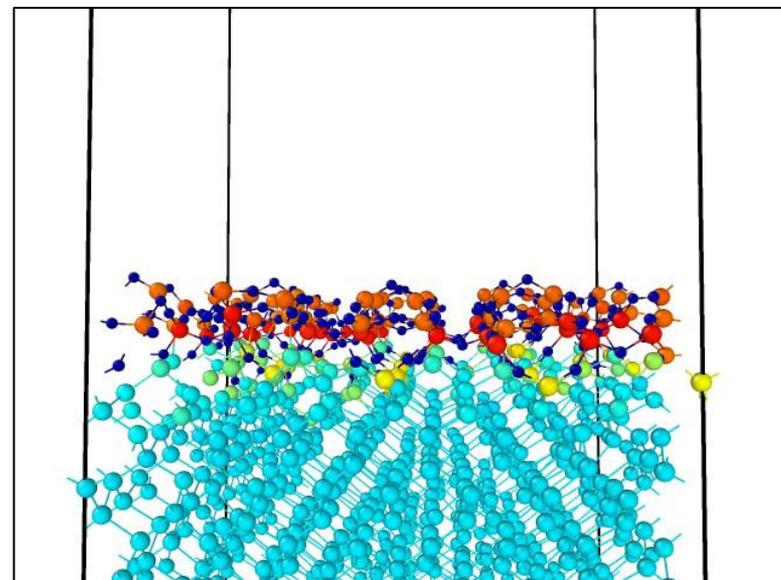
- ▶ SV演習で扱った手法
- ▶ 原子レベルでの強度信頼性問題に活用
- ▶ 現在の主なテーマ
  - ▶ 半導体メモリの残留応力
  - ▶ パワーデバイス関連（転位、酸化）
  - ▶ 自動車エンジンの摩擦潤滑



W膜の成長



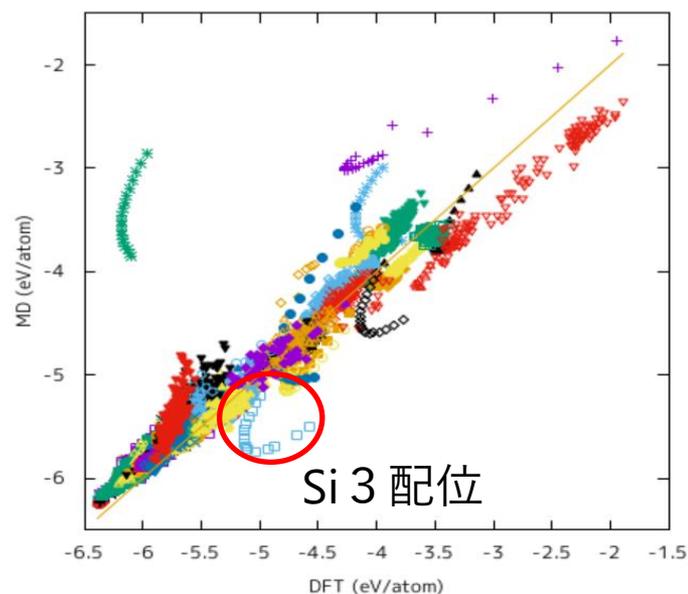
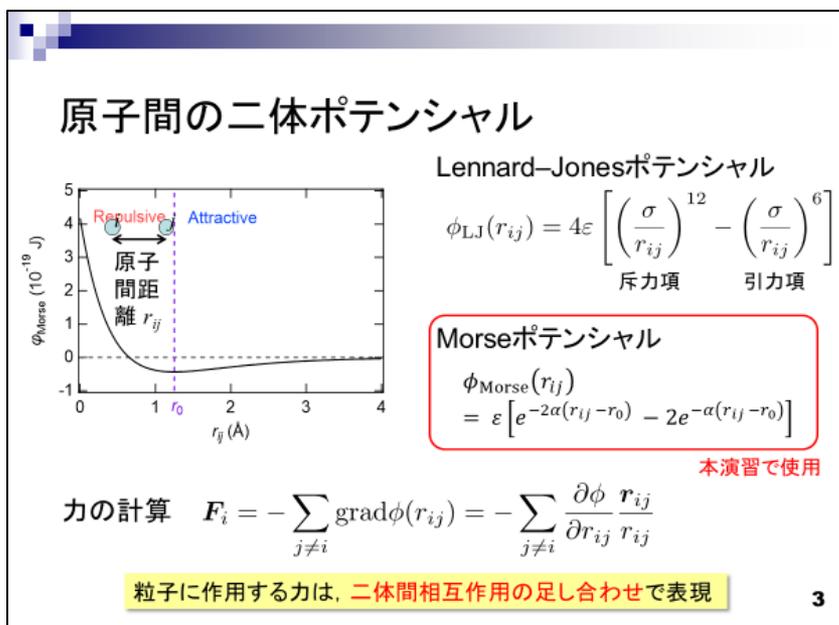
せん断による摩耗粉（鉄粉）の消化



シリコン結晶の酸化

# 原子間ポテンシャル

- ▶ 原子間の相互作用は原子間ポテンシャルで決まる
- ▶ 信頼できるシミュレーションのためには、適切な関数形とポテンシャルパラメータが必要。なければ自分で作る！
- ▶ 研究室では長年、古典的な関数系を用いた原子間ポテンシャルの作成を行ってきている



SiO<sub>2</sub>の原子間ポテンシャルの作成例  
古典的な関数形では、関数形の制約でフィッティングが難しい部分が生まれてしまう。

# 深層学習型原子間ポテンシャル

- ▶ 近年では原子間ポテンシャルとして、深層学習ネットワークを活用しようとする動きが盛ん（n2p2, aenet, physnet等々）
- ▶ そこで、これまでのノウハウを活用して深層学習ポテンシャルも開発できるようにしたい

## 研究テーマ

深層学習型ポテンシャルを活用した原子間ポテンシャルを作成し、より信頼性の高いポテンシャルを作る方法を考える

具体的には・・・

1. 研究室で行っているMDのテーマのどれかに参加
2. 先輩と協力して、深層学習型のポテンシャルを用いてパラメータフィッティング（十分な学習データを揃えるにはどうしたら良い？、どうやって評価する？）
3. 研究室で開発している古典ポテンシャルとの比較（それぞれの長所、短所は？、シミュレーション結果に違いは？）
4. 作成したポテンシャルを活用して、現象解明に貢献！（反応、応力、摩擦等々）