

# 機械学習原子間相互作用による構造材料の定量原子シミュレーション

基礎工学研究科 機能創成専攻

教授 尾方 成信

 <https://researchmap.jp/read0185246>

助教 新里 秀平

 <https://researchmap.jp/3201>



## 研究の概要

本研究では、第一原理電子状態計算 (DFT) の定量性を学習した機械学習原子間相互作用 (MLIP) を構築し、GPU 加速と組み合わせることで、数百万原子規模でも高精度に計算できる原子シミュレーション基盤を提供します。水素雰囲気や高温などの極限環境下での特性評価、組織と機械特性の関係解明、変形・破壊機構の原子論的詳細を、ハイエントロピー合金、鉄鋼、各種合金、セラミックス材料などあらゆる構造材料に対して実験前の定量予測を可能とします。

## 研究の背景と結果

次世代の構造材料を設計開発し、また極限環境で安全に使うためには、最先端の計測・実験に加えて、原子レベルで因果関係を解き明かす原子シミュレーションが不可欠です。とりわけ、多様な元素を含み、多様な化学環境下において、転位やき裂、界面、侵入・置換原子が複雑に絡み合う実材料の機械的応答を定量的に捉えるには、数百万原子規模で長時間の挙動を追跡できる解析基盤が必要です。

しかし、第一原理電子状態計算に基づく原子シミュレーションは、高精度である一方、計算負荷がモデルサイズの3乗で増大するため、現実的なスケールへの適用が困難でした。逆に、経験的原子間相互作用を用いる古典分子動力学法は、大規模計算が可能でも、化学結合の組み替えや電子状態の変化を適切に表現できず、定量予測には限界がありました。

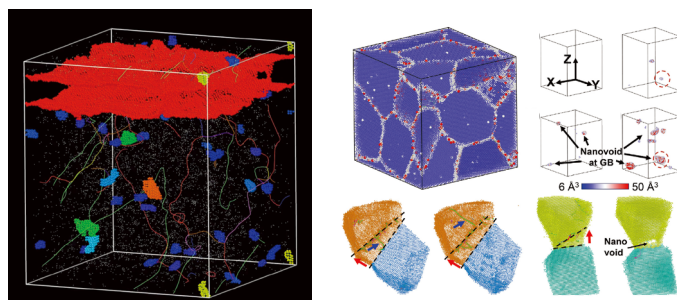
そこで私たちは、第一原理計算で得たエネルギー・力・応力を教師データとして学習する構造材料に適したニューラルネットワーク型の機械学習原子間相互作用 (MLIP) を設計し、GPU (Graphics Processing Unit) による並列化と組み合わせました。これにより、第一原理並みの精度を保ちながら古典分子動力学法並みの計算効率を実現し、数百万原子規模のモデルを用いることで、様々な格子欠陥や固溶元素などが動的に相互作用する状況を解析可能としました。

本技術を用いて例えば、水素脆化では、水素の転位や粒界との相互作用を可視化・定量化し、水素脆化発現の素過程を提示しました。ハイエントロピー合金では、熱処理時の化学秩序形成と強度・韌性への影響を予測しました。セラミックスについては、塑性変形能の定量化や塑性変形や破壊のメカニズムを解明することに成功しました。

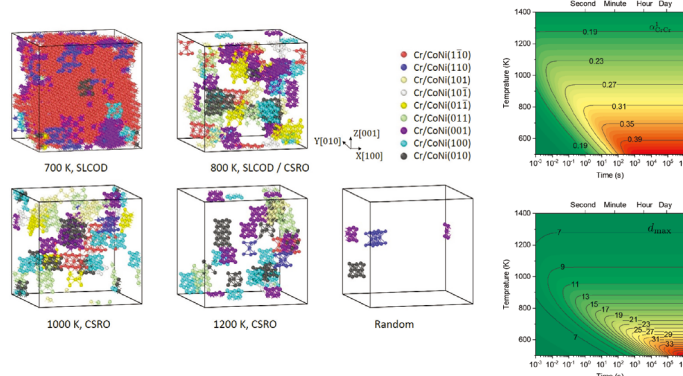
## 研究の意義と将来展望

高精度・高効率の機械学習原子間相互作用の構築は、これまでの第一原理計算や古典分子動力学法などの原子シミュレーションに存在した精度と効率のトレードオフ関係を打破し、それらの両立を可能とした、構造材料原子シミュレーション技術のブレークスルーです。これにより、実験観察・計測が困難な条件下での構造材料の正確なふるまいや定量データの獲得、全く新しい構造材料特性の実験前の定量予測と新構造材料設計、最適特性をもたらすプロセス技術のチューニングなどが可能となり、極限環境下で用いられる次世代構造材料の開発を飛躍的に加速させることが期待されます。

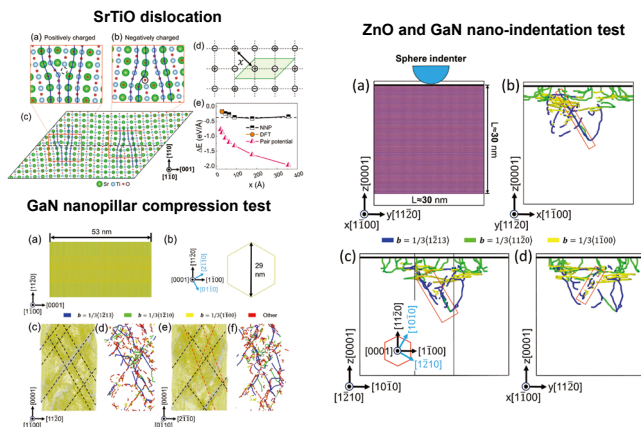
## Hydrogen Embrittlement of Fe and Steel



## Diffusion and Chemical Ordering in High Entropy Alloys



## Plastic Deformation of Ceramics



特許

Meng, Fan-Shun; Shinzato, Shuhei; Matsubara, Kazuki et al. A neural network interatomic potential for the ternary  $\alpha$ -Fe-C-H System: Toward million-atom simulations of hydrogen embrittlement in steel. JOM. 2025, 77, 8101-8117. doi: 10.1007/s11837-025-07721-4  
 Hossain, Rana; Ogata, Shigenobu. Unveiling kink band formation mechanism in MAX phases. Communications Materials. 2025, 6, 51. doi: 10.1038/s43246-025-00766-7  
 Zhang, Shihao; Li, Yan; Suzuki, Shuntaro et al. Neural network potential for dislocation plasticity in ceramics. npj Computational Materials. 2024, 10, 266. doi: 10.1038/s41524-024-01456-7  
 Li, Yangen; Du, Jun-Ping; Shinzato, Shuhei et al. Tunable interstitial and vacancy diffusivity by chemical ordering control in CrCoNi medium-entropy alloy. npj Computational Materials. 2024, 10, 134. doi: 10.1038/s41524-024-01322-6  
 Meng, Fan-Shun; Shinzato, Shuhei; Zhang, Shihao et al. A highly transferable and efficient machine learning interatomic potentials study of  $\alpha$ -Fe-C binary system. Acta Materialia. 2024, 281, 120408. doi: 10.1016/j.actamat.2024.120408

参考URL

<https://tsme.me.es.osaka-u.ac.jp/jp/>

キーワード

原子分子シミュレーション、機械学習、構造材料