機械学習ポテンシャルを用いた Ni-P および Ni-Fe アモルファス金属の形成シミュレーション

Molecular dynamics study of structural properties of amorphous Ni-P and Fe-P alloys using the machine-learning-based interatomic potentials

島大 NEXTA　平山　尚美

Shimane Univ. , Naomi Hirayama

E-mail: n.hirayama@riko.shimane-u.ac.jp

アモルファス合金の機械特性や化学的な性質は、原子配置や微細結晶の存在など微視的な構造特性から影響を受ける。我々は Ni-P および Ni-Fe アモルファス合金に着目し、分子動力学法による液体急冷シミュレーションの結果から、短距離および中距離の秩序構造を調査した。

本研究では、局所的な秩序性を含む複雑な原子配置を解析するため、まず、第一原理電子状態計算の結果を用いて、機械学習による原子間（Ni-P, Fe-P）ポテンシャルを作成した。次に、得られた原子間ポテンシャルを用いて、液体急冷法によるアモルファス化シミュレーションを分子動力学計算コード Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)により実行した。そしてその結果を、配位数、動径分布関数、ボロノイ多面体などの観点から解析した。

今回作成した機械学習ポテンシャルは、高温における乱れた原子配置での第一原理計算の結果を従来の Embedded Atom Method（EAM）によるポテンシャルよりも精度良く再現した。また、Fe-P については、磁性の有無によってポテンシャル形状が変化することが示された。この事から、Fe 基アモルファスでは、磁性の有無が微視的な構造特性を左右する可能性が示唆される。

また、アモルファス化シミュレーションでは、元素組成（5%, 10%, 15%, 20%）と冷却速度が構造特性に及ぼす影響を調査した。その結果、P の割合が小さいほど局所的な秩序構造が発生しやすいことが分かり、実験事実を定性的に再現した。一方、2000 K の溶融状態から 300 K までの冷却速度については、今回比較した条件（冷却に要する時間：0.1 ns ~10 ns）においては明確な差が見られなかった。そこで、単金属（bcc Fe, fcc Ni）の微小結晶を系の中に組み込み、それぞれの結晶化温度の付近で保持することで、結晶成長のシミュレーションを行なった。この計算結果を、従来のポテンシャルと機械学習ポテンシャルとで比較することで、原子間ポテンシャルの性能がアモルファス合金の局所的な秩序構造や結晶成長過程に及ぼす影響を調査した。

© 2022年 応用物理学会