

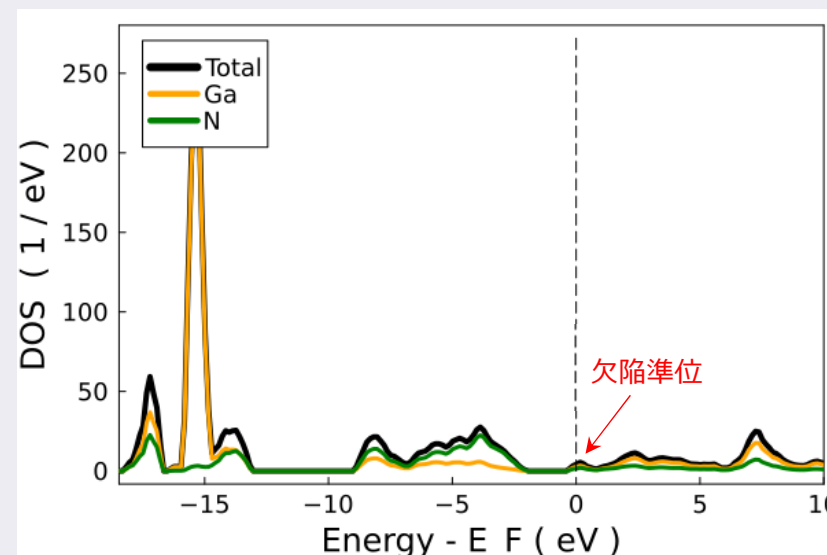
2023年8月、Advance/NanoLabo Ver.2.9 リリース

# 汎用タイトバインディング法 ThreeBodyTB に対応



NIST の開発した汎用タイトバインディング法である ThreeBodyTB (<https://pages.nist.gov/ThreeBodyTB.jl/>) のインターフェースを Advance/NanoLabo Ver.2.9 に搭載しました。一般に、タイトバインディング法はハミルトニアン行列要素などを経験的なパラメータで近似する手法であり、第一原理計算に比べて非常に計算コストが軽く、比較的に大きな系を短い時間で計算できるというメリットがあります。また、分子力場法と異なり、状態密度やバンド構造などの電子状態の解析も可能であるという特徴があります。しかしながら、パラメータセットを計算対象の系に応じて都度用意する必要があり、且つ、パラメータセットの作成も一般ユーザーには極めて難易度が高いというデメリットがありました。この問題を解決したのが ThreeBodyTB です。ThreeBodyTB では、事前に実施された 800,000 件の DFT 計算のデータを用いて 65 元素(左下図)について最適化されたパラメータセットが用意されています。DFT 計算のデータとしては、65 種の 1 元系および 2080 種の 2 元系の結晶が用いられています。s, p, d 軌道から成る無機材料であれば、比較的に精度よくエネルギーおよび電子状態が計算できます。不純物や欠陥を含む半導体材料などに対して、簡易的に電子状態を解析する目的などに適しています(右下図：欠陥を含む GaN の状態密度の例)。

ThreeBodyTB で利用可能な 65 元素 (Phys. Rev. Materials 7, 044603)



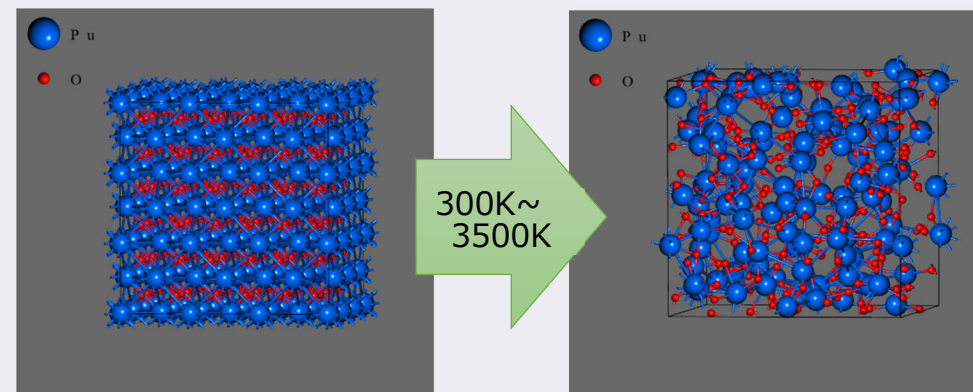
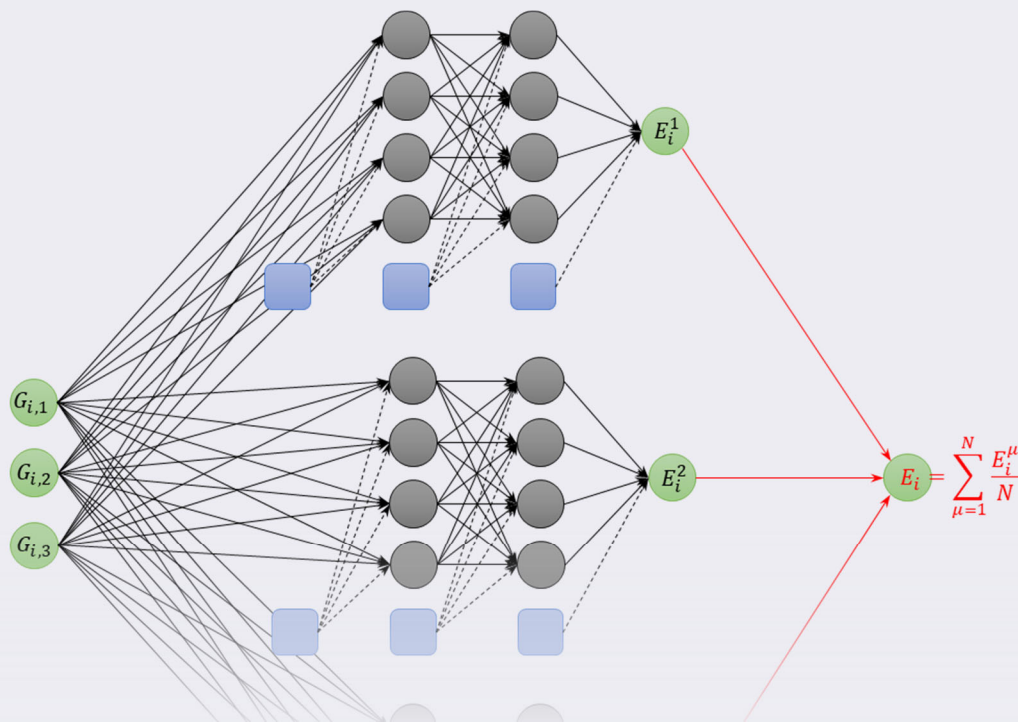
窒素欠陥を含む GaN の状態密度図

2023年8月、Advance/NeuralMD Ver.1.9 リリース

# わずか **1,000** 構造の教師データで 核燃料材料の融点を再現する新手法を搭載



Advance/NeuralMD では、各原子の化学環境を表現した対称関数( $G_i$ )を入力データとした多層パーセプトロンを Neural Network 力場としています。この多層パーセプトロンはエネルギー( $E_i$ )を出力するわけですが、Ver.1.9 では複数の多層パーセプトロンを用意してその平均値でエネルギーを表現するという新しい機能が搭載されました(左下図)。分子動力学計算の過程で出現する構造が教師データに含まれないような外挿領域にあっても、単一の多層パーセプトロンを用いる場合に比べて精度が向上し、安定したシミュレーションを実現します。特に、無機材料が溶融した状態やアモルファス構造に対して有効です。また、 $\Delta$ -NNP 法や自己学習ハイブリッドモンテカルロ法と併用することで、より少ない数の教師データで安定した Neural Network 力場が作成できるようになりました。右下図に、当該手法を  $\text{CeO}_2$ 、 $\text{UO}_2$ 、 $\text{PuO}_2$  の溶融過程に適用した事例を示します。24 原子系のスーパーセルを用いて、650~1600 構造ほどの教師データで Neural Network 力場を学習させています。極めて少ない教師データ数で、融点の実測値を概ね再現できることが確認できています。



	教師データ数	RMSE	融点の計算値	融点の実験値
$\text{CeO}_2$	1634	0.020 eV/atom	2299°C	約2400°C
$\text{UO}_2$	650	0.018 eV/atom	2476°C	約2800°C
$\text{PuO}_2$	1078	0.018 eV/atom	2376°C	約2400°C