

スピン状態を考慮したニューラルネットワークポテンシャルの開発

Designing Neural Network Potentials for Spin-Dependent Systems

パナソニックホールディングス株式会社¹ ○上野 航輝¹, 大内 暁¹, 市川 和秀¹, 網井 圭¹,
若杉 健介¹

Panasonic Holdings Corporation¹, °Koki Ueno¹, Satoru Ohuchi¹, Kazuhide Ichikawa¹, Kei Amii¹,
Kensuke Wakasugi¹

E-mail: ueno.koki@jp.panasonic.com

ニューラルネットワークポテンシャル (NNP) は、DFT 計算の高精度を維持しつつ計算コストを大幅に削減する手法として注目されている。しかし、従来の NNP モデルはスピン状態を考慮しておらず、遷移金属酸化物のような、スピン状態が物性に重要な影響を与える材料系への適用は困難であった。本研究では、スピン状態を統合した NNP モデル SpinMultiNet を提案する [1]。本モデルは、構造および初期スピン推定値を入力とし、エネルギー、力、およびスピンを同時に予測するマルチタスク学習を採用する。E(3)および時間反転同変性を備えたネットワークで初期推定スピンが最適化され、正しいスピン状態、およびそれに伴うエネルギー等を推論可能である。

学習データとして、様々な構造およびスピン状態での DFT 計算を行った Mn-Co-Ni 酸化物データセットを利用した。SpinMultiNet は、スピン状態に依存したエネルギー、力、磁気モーメントを精密に予測可能であり (Fig. 1)、エネルギーの平均絶対誤差は従来モデルと比較して 73.2%改善された。さらに、FM (強磁性) および AFM (反強磁性) のスピン配置を持つ構造間のエネルギー順序を正確に再現することを確認した。特に、岩塩型の NiO や MnO において、超交換相互作用に起因するエネルギー順序を再現し、構造緩和後の格子定数、特に AFM type-II における菱面体歪みは実験結果と非常によく一致した。

SpinMultiNet の設計により、従来手法では困難であった大規模かつ多様なスピン依存系のシミュレーションが可能となり、材料開発の高速化が期待される。

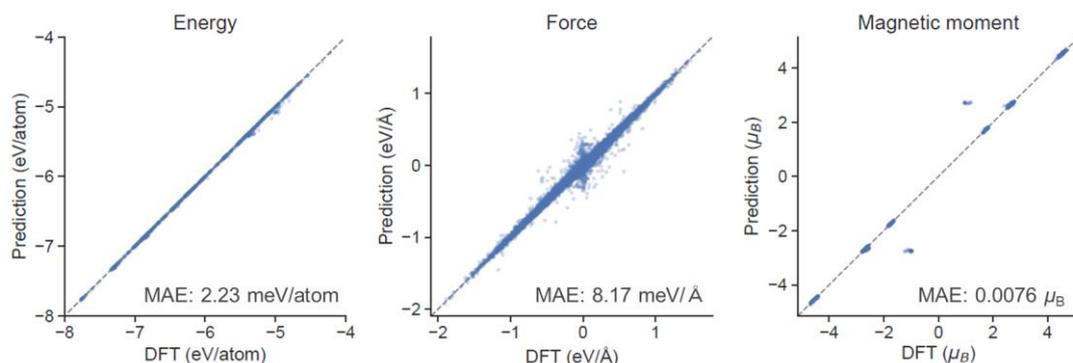


Fig.1 Scatter plots of predicted values versus DFT calculated values for each property in the Mn-Co-Ni dataset. (a)Energy, (b) Forces, (c) Magnetic moments.

[1] K. Ueno, S. Ohuchi, K. Ichikawa, K. Amii, K. Wakasugi, arXiv:2409.03253