

持続可能な社会の実現に貢献する材料設計技術

(富士通) ○^{じっぽう ひでゆき} 貴宝 秀幸

1. 緒言

私たちの社会が持続可能な発展を遂げるためには、高性能かつ環境負荷の少ない新しい材料の開発が不可欠である。しかし、材料開発の現場では、二つの異なる物質が接する「界面」など、原子や分子レベルで複雑な現象が起こる大規模な系において、その詳細なメカニズムを解明することが困難であるという課題を抱えていた。

本発表では、この課題に対し、材料設計を加速させるための最先端のコンピューティング & AI 技術、具体的には「分子動力学(Molecular Dynamics; MD)シミュレーション向けニューラルネットワーク(Neural Network Potential; NNP)作成技術」と「因果発見技術」を紹介する。これらの技術は、従来の限界を超え、原子レベルでの現象解明と効率的なプロセス最適化を可能にすることで、持続可能な社会を実現する材料開発に貢献する。

2. MD シミュレーション向け NNP 生成技術

材料の機能を理解するためには、原子レベルでの動的な挙動の評価が重要であり、特に界面におけるダイナミクスは材料性能に大きく影響する。しかし、そのダイナミクスをシミュレーションするには、古典的手法の精度の限界や、高精度な第一原理計算の計算コストの高さという課題があった。そこで、我々は、この課題を解決するため、独自の能動学習手法を用いた NNP 生成ツールを開発した。これにより、第一原理計算と同等の精度を保ちながら、数万原子から成る系の数十ナノ秒もの長時間シミュレーションが可能になった。この技術は、半導体材料表面のウェットエッチング(図 1)や全固体電池の固体電解質界面層形成など、これまで直接観察が困難だった原子レベルの現象を計算機上で可視化し、そのメカニズム解明を通じて高性能な材料設計に貢献する。

3. 因果発見技術

材料製造プロセスにおける多岐にわたるパラメータが製品品質に与える影響を把握することは重要である。近年、機械学習がパラメータ最適化に活用されているが、得られた最適化結果の妥当性評価が困難で、従来の相関分析では熟練者の経験に頼り数週間を要していた。そこで、我々は、この課題に対し、データから直接的に原因と結果の関係を抽出する因果発見技術を開発した。これにより、統計的相関だけでなく、本質的な因果関係をデータから導き出すことが可能となる。応用例として、GaN-HEMT 半導体デバイスの SiN 絶縁膜蒸着プロセス測定データに本技術を適用した結果(図 2)、2 週間かかっていた検証作業を約 1 日に短縮できることを実証した。この技術は、開発初期段階での迅速なフィードバックを可能にし、材料開発の時間とコスト削減に大きく貢献する。

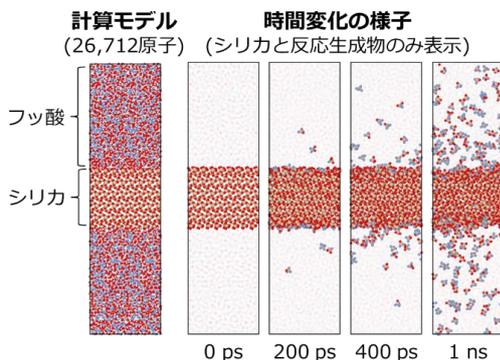


図 1. シリカ表面をフッ酸でウェットエッチングする MD シミュレーション過程

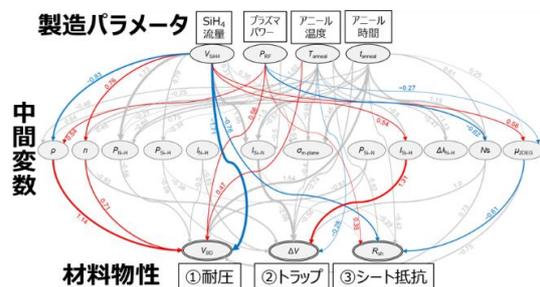


図 2. GaN-HEMT 半導体デバイスにおける SiN 絶縁膜蒸着プロセスの測定データに対する因果グラフ

本内容は 10 月 30 日(木)から開催される石油学会郡山大会 (第 55 回石油・石油化学討論会) で発表される。