

原子レベルでの加工現象の機械学習援用理論解析

大阪大学大学院工学研究科 稲垣耕司

- 目的 各種超精密加工の原子除去メカニズムを原子レベルでの機械学習ポテンシャルを用いた大規模シミュレーションにより解明する
- 内容 グラフニューラルネットワークに基づくNequipアプリケーションによる機械学習ポテンシャルを生成するための学習データを効率よく収集する手法の開発実施と加工現象の解析への適用準備
- 結果 Si/O/H系の界面構造をデータとした機械学習ポテンシャルの作成を試行した。元素数の増加により複雑性が増し、計算を破綻させないポテンシャルを生成するにはデータが不足しており、さらなるデータが要求されることが分かった。第一原理計算により歪Siの水によるエッチング過程を解析した。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間	78.38
使用メモリ	30 GB
並列化	1ノード 並列

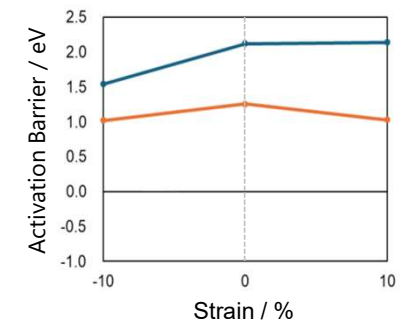
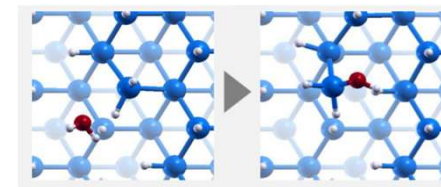


図 歪シリコンのエッチング過程と活性化バリア