

原子間ポテンシャル整備のためのデータの品質管理に関する研究

66809 野田 直志
指導教員 鎗目 雅 准教授

Along with the development of IT environment, huge amount of material data is maintained. Therefore, appropriate data management is required. In this paper, I have tried to control quality data and model complementary. First, I took a panoramic view of material dataset to maintain data. And then I made a system to adjust parameter of inter atomic potential to material properties in order to control quality of database and model complementary.

Key words : Quality control, Material data, Inter atomic potential.

1. 緒言

近年の情報化社会においては、ネットワークを通し膨大な量の情報・データに誰でもアクセスでき、また誰もが容易に情報を発信できるような環境が世界中に広まりつつある。しかし、一個人では処理できないような大量のデータでも、実際に役に立つデータは限られているといった状況は、誰も経験することである。このような状況下で、特に自らが情報を発信しようとする場合には発信する情報の質の向上が重要であり、社会への貢献度や注目される度合い(端的には、例えば Web によるアクセス数)は、この発信される情報の質に左右されているといっても過言ではない。学術的・科学的分野でのデータについても同様な傾向がみられ、本研究で対象とする物質・材料データについても、その価値・品質向上が求められるようになってきている。多くの大学・研究所には、出版社などが提供する各種の文献データベースや検索システムにより、大量の学術的・科学的データを容易に得ることができる環境が備わっている。しかし、多くの場合、必要な材料データは文献中の文章や表・図の中に含まれ、これから必要なデータを獲得し吟味するまでの過程には、いくつかの手順が必要である。すなわち、データの品質・信頼性を担保・管理するための手法の確立が重要であると考えた。

また質の異なる複数のデータが、互いに矛盾のないものであるかどうかを知るためには、な

んらかの理論的關係式や、経験的な相関式の利用が不可欠である。質の異なるデータをより基本原理的な理論や計算で結び付けることが可能となれば、これはそのままデータの品質管理に利用できる。しかし、多くの場合、そのような基本原理に基づいた手法は、複雑で大がかりな計算を必要とすることが多く、データベースの構築や管理といった実際のデータ品質管理の現場において使われることはそう多くない。これからの材料データベースの構築・データ更新などにおけるデータの品質管理の問題解決には、基本的原理・理論・実施可能な計算手法の利用が不可欠であると考えた。

2. 目的

以上のような状況を踏まえ、本研究では、最適な材料データへの品質管理の方法論を提示することを目的とする。特に、材料データへの俯瞰図の作成と、よく知られた目的依存型の物理モデル(理論)としての原子間ポテンシャルを活用するという、二通りのデータの品質管理のアプローチを試みることにする。以下に研究目的の要点を掲げる。

- 材料データを統計的手法を活用して俯瞰する手法について検討する。
- データ間の関連付けを行う手法をポテンシャルとデータを例題として検討する。

3. データの俯瞰

3.1 M.F Ashby による材料データの品質管理について[1]

M.F.Ashby は range check と correlation check の二段階による品質管理の方法を提案した。range check とは材料データが結合状態と結晶構造が決まれば、物性値がある幅に収まることを利用して物性値をはじくことである。range check の次に correlation check を行う。correlation check とは体積弾性率と融点といった物理相関を利用して、誤入力の可能性のあるデータに着目する方法である。本研究でも M.F.Ashby が提案した方法は有力であると考え俯瞰的にデータを眺めることから材料データの品質を高めようとした。

3.2 データの俯瞰

3.2.1 Linus Pauling File(LPF)について

本節では Linus Pauling File(LPF) とよばれるデータベースを研究に用いる[1]。LPF とは過去 100 年にわたる物質・材料に関するデータを格納したデータベースと、そのデータを閲覧・検索する機能を備えたブラウザからなるデータシステムである。約 13 万件の原著論文から抜粋した、二元系の合金、金属間化合物、無機材料に関するデータを有している。

3.2.2 格子定数の俯瞰

本まず LPF 内の物性値俯瞰的に眺めるため、度数分布を利用して、物性値をプロットした。

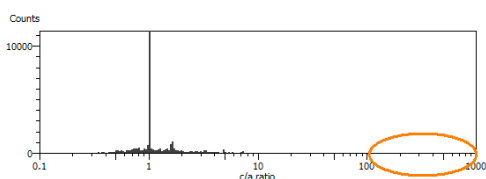


Fig.1 : 格子定数比 c/a の度数分布

Fig. 1 は LPF 中に含まれる格子定数 a/c の度数分布である。1 を中心に 0.1 から 10 にわたって分布していることがわかる。またこの俯瞰から c/a が 100 から 1000 に入る極端に大きい値をもつデータがあることがわかる。このようなデータに着目することが品質管理の基本的な方法であると考えデータを調べた。Fig 2 は見つかったデータの詳細である。

Entry	Formula (phase)	c/a	Structure type
S1251330	SiC	115.31	SiC,hR282,160

Fig 2: 格子定数比 c/a が大きい物質

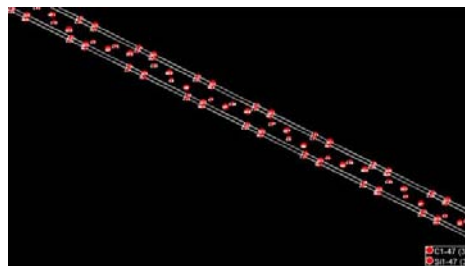


Fig 3:分析対象とした SiC の結晶構造

3.2.2 NaCl 型化合物の格子定数の俯瞰

格子定数は結晶構造に依存するため、今節では結晶構造を NaCl 型に絞ってデータを眺めた。

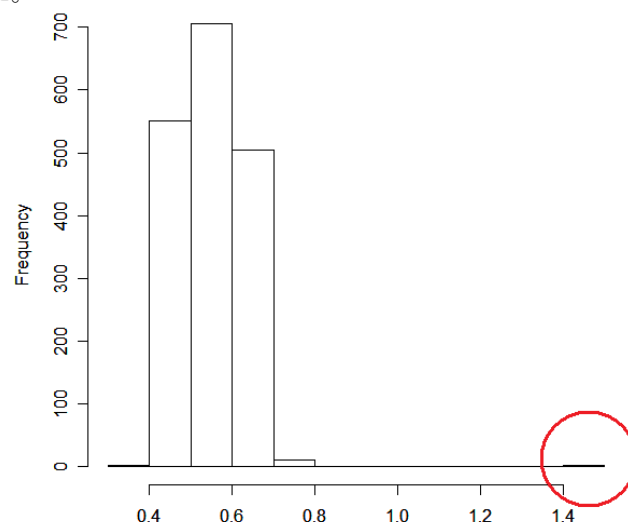


Fig. 4 : NaCl 型結晶構造を持つ化合物の格子定数の度数分布

Fig.4 は NaCl 型結晶構造を持つ化合物の格子定数の度数分布を示したものである。0.4 から 0.7 にかけてほとんどのデータが分布していることがわかる。ただし一つだけデータのほかと比べて二倍近く大きいものがあることがわかる。前節同様データを調べることにした。Fig. 5 は格子定数が NaCl 型結晶構造をもつ物質で格子定数が 1.4 より大きい物質を示している。

Entry	Formula (phase)	Structure type (publ.)	a [nm]	b [nm]	c [nm]
S1400029	RbC60	NaCl,cF8,225	1.4072	1.4072	1.4072

S1400039 KC60 NaCl,cF8,225 1.406 1.406 1.406

Fig. 5 : NaCl 型結晶構造をもつ物質で格子定数が大きい物質

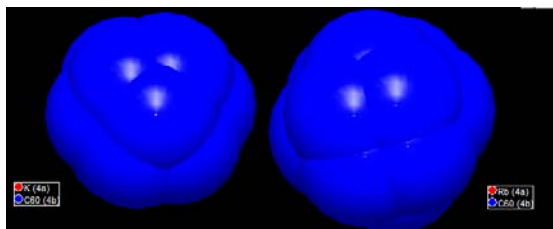


Fig. 6 : Fig5 で示した物質の結晶構造

3.3 材料データ俯瞰図獲得のための主成分分析の活用

主成分分析を活用して元素データの俯瞰図を得ようと試みた。元素データの分析は古くから行われており、本研究は物理的には何の意味ももたないと考えられるが、主成分分析を活用することで、多変量の材料データを効率良く眺めることができる一例として紹介する。対象とした元素は次の36種類である。

Li, Be, Na, Mg, Al, Si, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ge, Sr, Y, Zr, Nb, Mb, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au

また物性値として Fig.7 に示す二十種類を利用した。データは独立行政法人 物質・材料研究機構が公開しているデータを用いた[3]。

物性値	図中の省略記号
Atomic number	AN
molar volume	molar_volume
First ionization energy	first_ionic
Second ionization energy	SI
Third ionization energy	TI
Metal radius	MR
Zunger pseudo-potential radius	ZR.prm
Atomic radius	AR
Thermal conductivity	thermal.con
molar heat of capacity	MHC
Melting point	MP.C
Molar heat of fusion	MHF
Valence electron number	VE
Pauling Electronegativity	PE
Absolute Electronegativity	AEN
Oxide state	OS1
Density	Density
Cohesive energy	Coh
Molar enthalpy atomira	MEA
Martynov-Batsanov electronegativity	MEN

Fig7 : 対象とした物性値

Fig.8 と Fig.9 は第一主成分・第二主成分を求めプロットした図である。主成分得点を元にそれぞれの元素をプロットした。またそれぞれの説明変量を主成分負荷量を元に、赤色の矢印でプ

ロットした。Fig.8 は元素データがアルカリ金属・アルカリ土類金属と遷移元素に分類できることを示している。Fig.9 は物性値をいくつかのクラスターとして分類できることを示している。

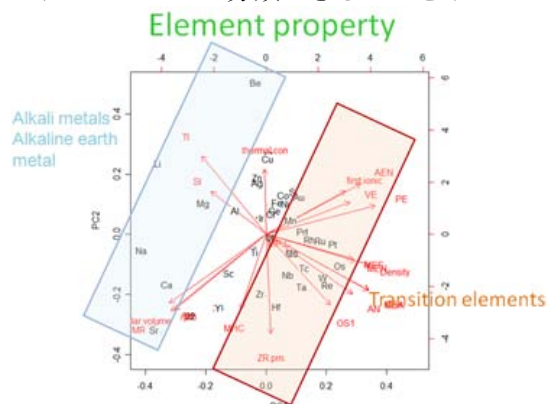


Fig.8 : 第一主成分と第二主成分でプロットした図

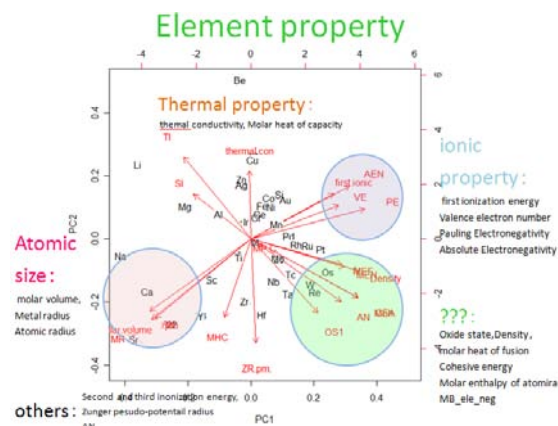


Fig.9 : 第一主成分と第二主成分でプロットした図

4. 原子間ポテンシャルを活用した品質管理について

4.1 背景

原子間ポテンシャルとは、端的に言えば、原子間の複雑な相互作用を調べるため、近似的に原子間に働く力を算出するための関数で表現したもので、分子動力学法のシミュレーションに用いられる。

4.2 目的

原子間ポテンシャルのパラメーターを物性値からフィッティングすることは、多様な意味を持つ基礎物性データを、ポテンシャルとして少ないパラメーターに集約するプロセスであると考えられる。物性データとポテンシャルを比

較・評価することは、原子間ポテンシャル自身の意味を明らかにする事に繋がると考えた。以上の観点から、関連知識全体の質の向上に向けて、データベースと原子間ポテンシャルを連結させるための情報環境の整備を試みた。Fig.10は原子間ポテンシャルとデータの関係を示している。赤い矢印が本研究の位置付けである。

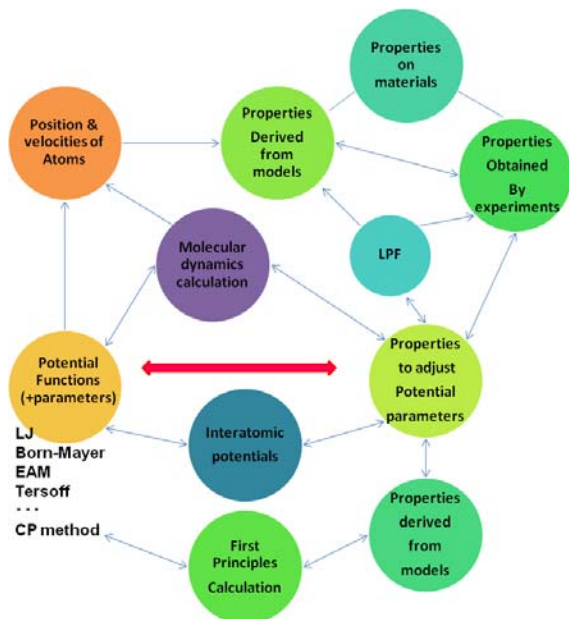


Fig.10 : 本研究の位置付け

4.3 方法

原子間ポテンシャル整備への第一歩として、レナードジョンス (LJ) ポテンシャルのパラメーターを求めるシステム開発を行った。

4.4 システムの概要

本研究では以下の表式のLJポテンシャルを用いた。rは原子間の距離を表している。ここでεとδはパラメーターである。また本研究では金属を対象としたので、m=8, n=4に設定した。inputとして凝集エネルギーと格子定数を与えれば、LJポテンシャルのパラメーターを返すシステムを実装した。

$$\epsilon \left(\frac{\delta^m}{r^m} - \frac{m \delta^n}{n r^n} \right)$$

4.5 結果

開発した今回のシステムを利用して単体へfittingを行った。また体積弾性率をポテンシャルから計算した。プログラムを組むことにより、複数のデータに簡便にfittingを行うこと

ができた。凝集エネルギーと最近接距離のデータは Kittel 固体物理学[4]から引用した。

原子番号	元素	凝集エネルギー (eV/atom)	結晶構造	最近接距離 (Å)	δ	ε	体積弾性率 (推定値) [eV/Å ³]
3	Li	1.63	bcc	3.023	3.654555	0.069376	0.27252
11	Na	1.113	bcc	3.659	4.423426	0.047371	0.10494
13	Al	3.39	fcc	2.86	3.36742	0.143407	0.72866
18	Ar	0.06	fcc	3.76	4.427098	0.003384	0.00757
19	K	0.934	bcc	4.525	5.470348	0.039753	0.04656
20	Ca	1.84	fcc	3.95	4.650808	0.077837	0.15012
23	V	5.31	bcc	2.62	3.167362	0.226004	1.3637
24	Cr	4.1	bcc	2.5	3.022292	0.174504	1.21197
26	Fe	4.28	bcc	2.48	2.988113	0.182165	1.29604
28	Ni	4.44	fcc	2.49	2.931775	0.187825	1.44613
29	Cu	3.49	fcc	2.56	3.014194	0.147637	1.04599
36	Kr	0.116	fcc	4	4.709679	0.004907	0.00911
37	Rb	0.852	bcc	4.837	5.84753	0.036263	0.03477
38	Sr	1.72	fcc	4.3	5.062905	0.072761	0.10878
41	Nb	7.75	bcc	2.86	3.457502	0.329855	1.53015
42	Mo	6.82	bcc	2.72	3.288253	0.290273	1.56533
45	Rh	5.75	fcc	2.69	3.167259	0.243241	1.48537
46	Pd	3.89	fcc	2.75	3.237904	0.184558	0.94053
47	Ag	2.85	fcc	2.89	3.402743	0.124793	0.61454
55	Cs	0.804	bcc	5.235	6.328679	0.03422	0.02588
56	Ba	1.9	bcc	4.35	5.258787	0.080868	0.10681
58	Ce	4.32	fcc	3.65	4.297582	0.182748	0.44671
63	Eu	1.86	bcc	3.86	4.76731	0.079165	0.13634
70	Yb	1.6	fcc	3.88	4.568388	0.067685	0.13774
73	Ta	8.1	bcc	2.66	3.457502	0.344752	1.59925
74	W	8.9	bcc	2.74	3.312432	0.378802	1.99633
77	Ir	6.84	fcc	2.71	3.190607	0.293582	1.75337
78	Pt	5.84	fcc	2.77	3.261452	0.247049	1.38164
79	Au	3.81	fcc	2.88	3.390969	0.161174	0.80199
82	Pb	2.03	fcc	3.5	4.120969	0.065875	0.23808
89	Ac	4.25	fcc	3.76	4.427098	0.179787	0.40202
90	Th	6.2	fcc	3.6	4.236711	0.262276	0.6682

Fig.11 : fittingに利用した物性値とパラメーター及び体積弾性率

5. 結語

材料データの品質管理に挑戦し、データを俯瞰的に眺める手法についてLPFデータベースを例に、その有効性を確認した。また基礎物性データからポテンシャルパラメーターを算出する手順を整備した。

文献

- 1) M. F. Ashby (1998), PROCEEDINGS OF THE ROYAL SOCIETY OF LONDON SERIES A-MATHEMATICAL PHYSICAL AND ENGINEERING SCIENCES 454, 1973, 1301-1321
- 2) P. Villars, et al, ed: Pauling File Binaries Edition version 1.0, Tokyo, Japan science and Corporation and Material Phases Data System
- 3) 独立行政法人物質・材料研究機構
- 4) C. Kittel: “キッテル固体物理学入門”, 第八版, 丸善出版事業部