# 卒業論文

# 深層学習を用いた分子動力学計算による 炭素を添加した非晶質シリカの構造と機械 特性の解明

03-200178 小川京悟 指導教員泉 聡志 教授泉

### 深層学習を用いた分子動力学計算による炭素を添加した非晶質シリカの構造と機械特性の解明

小川 京悟, 指導教員 泉 聡志 教授 Key words: a-SiO2, molecular dynamics, melt-quench, deep learning, bulk modulus

### 1. 緒言

半導体メモリは高集積化のための微細化が行われてきた が、近年では微細化は限界に近づいており、高積層化による 性能向上が進められている.しかし高積層化に伴い歪みが蓄 積し、増大した内部応力による SiO<sub>2</sub> などの低誘電率の絶縁 膜の変形、割れや剥離の原因となっている.そこで絶縁膜の 機械的強度を向上し、破壊を抑えることが求められている.

宮崎 [1]は第一原理計算を用いて a-SiO<sub>2</sub>に C, N, P を添加 した場合の構造と弾性率に対する影響を調査した.その結果 いずれの場合でも体積弾性率は低下した.しかしながら,第 一原理計算は計算コストが大きく試行回数が重ねられない, また同一条件でも原子のランダムな初期配置による違いが 大きく体積弾性率は数割の差が生じる.そこで本研究では SiO<sub>2</sub> に炭素を添加したときの構造と弾性率への影響を明ら かにすることを目的に,深層学習を用いた分子動力学計算を 行う.これにより,第一原理計算とおおむね同等の精度で先 行研究よりも多様な条件,多くの試行回数での解析を行う.

### 2. 計算手法

本研究では、深層学習型のポテンシャルに基づく分子動力 学法を用いる.一般的に使用される経験的な原子間ポテンシ ャルは計算コストが小さい一方で精度に課題がある.これに 対し、原子間ポテンシャルに従来の関数形よりもはるかに高 い表現力もつ深層学習を適用することで第一原理計算に近 い精度の計算をより高速に行うことが期待されている.本研 究では深層学習を用いた汎用原子間ポテンシャル(PFP)を 用いて分子動力学シミュレーションを行った.

### 3. 計算結果

#### 3.1 a-SiO<sub>2</sub>構造の作成とその妥当性

アモルファス構造を作成する手法であるメルトクエンチ 法を用いて構造を作成した. 妥当性の確認として,作成した a-SiO<sub>2</sub>構造の動径分布関数を確認したところ,いずれも実験 値とがおおよそ一致していた. また同様に,作成した構造の エネルギーを第一原理計算結果と比較したところ,多少のシ フトは存在するものの,おおよそ一致していた. よって,本 手法で作成する a-SiO<sub>2</sub>構造は妥当なものであると判断した.

#### 3.2 炭素添加 a-SiO<sub>2</sub>の弾性率と構造の関係

ケイ素を 30 で固定し炭素数を 0-30, 酸素数を 40-60 まで 変化させアモルファス構造を作成し分析した. Figure 1 は作 成した構造を示す. 酸素数 40 と 60 を比較すると Figure 2 が 示すようにケイ素との結合相手が不足している酸素数 40 の



ほうが Si-C 結合を作りやすいということが分かった.



Figure 2Additive amount dependence of number of bonds without Si-O in a-SiO2:C

体積弾性率の炭素数,酸素数依存性はFigure3のようにな



#### Figure 3 Additive amount dependence of bulk modulus

った. この条件の範囲では炭素数の増加と酸素数の減少が体 積弾性率の増加と相関がある. 体積弾性率と気体分子(CO, CO2)数, リングに含まれない結合数, 4 配位未満の Si の数と の関係を調べると前者二つは相関がみられず, 後者には負の 相関がみられた.

#### 4. 結言

深層学習ポテンシャルを用いた分子動力学計算により, 様々条件で炭素添加 a-SiO<sub>2</sub>構造を作成し,その構造と体積弾 性率の関係を調査した. a-SiO<sub>2</sub>を基準とすると,炭素を添加 した場合,酸素を減少させた場合に体積弾性率は増加した. 分析の結果,結合のネットワークに取り込まれていない原子 が体積弾性率に与える影響は小さく,Si-C 結合が豊富に存在 する,Si が4配位をとっているなどの安定なネットワーク構 造が体積弾性率を増加させるということがわかった.これら の計算結果が第一原理計算による結果とどれだけ一致して いるか,また,モデルサイズが小さいため体積弾性率が非系 統的な影響を大きく受けている可能性があるという点は今 後の課題である.

#### 参考文献

[1] 宮崎桜子, "電子状態計算による不純物を添加した非晶質 シリカの構造と機械特性の解明," 2022.

Figure 1 Structure of a-SiO<sub>2</sub>:C (Si:30, O:60, C:10)

目次

目次

図目次	4
表目次	6
1 序論	8
1.1 研究の背景	9
1.2 先行研究	9
1.3 研究の目的および手法	10
1.4 本論文の構成	10
2 研究で用いた計算手法	12
2.1 第一原理計算	13
2.2 古典 MD 法	13
2.3 深層学習	14
2.4 Matlantis	14
3 a-SiO <sub>2</sub> の構造とその妥当性	16
3.1 a-SiO <sub>2</sub> の作成条件	17
3.2 作成した構造の妥当性	
3.2.1 構造の動径分布関数	19
3.2.2 構造のエネルギー	21
3.3 本章の結論	22
4 炭素添加 a-SiO <sub>2</sub> 弾性率と構造の関係	24
4.1 炭素添加 a-SiO <sub>2</sub> の構造の特徴	25
4.1.1 酸素原子数が 60 の場合	
4.1.2 酸素原子数が 40 の場合	27
4.1.3 酸素原子数が 50 の場合	
4.2 炭素添加 a-SiO <sub>2</sub> の構造と体積弾性率の関係	
5 結論と今後の課題	
5.1 結論	
5.2 今後の課題	
6 謝辞	
7 文献目録	

図目次

# 図目次

### 図目次

Fig. 3-1 Input temperature for melt quench calculation	17
Fig. 3-2 Strucure of a-SiO <sub>2</sub>	18
Fig. 3-3 Pair distribution function between O and O in a-SiO <sub>2</sub>	20
Fig. 3-4 Pair distribution function between Si and O in a-SiO <sub>2</sub>	20
Fig. 3-5 Pair distribution function between Si and O in a-SiO <sub>2</sub>	21
Fig. 3-6 Comparison of energies between DFT calculations and this work	22
Fig. 4-1 Structure of a-SiO <sub>2</sub> :C (Si:30, O:60, C:10)	26
Fig. 4-2 Additive amount dependence of number of bonds in a-SiO2:C	28
Fig. 4-3 Additive amount dependence of number of bonds without Si-O in a-SiO2:C	28
Fig. 4-4 Additive amount dependence of number of gas molecules	29
Fig. 4-5 Additive amount dependence of number of bonds not included in rings	29
Fig. 4-6 Additive amount dependence of number of Si less than 4-coordinate	30
Fig. 4-7 Additive amount dependence of bulk modulus	31
Fig. 4-8 Relationship between bulk modulus and number of gas molecules	32
Fig. 4-9 Relationship between bulk modulus and number of bonds not included in rings	33
Fig. 4-10 Relationship between bulk modulus and number of Si less than 4-coordinate	33

表目次	

Table 3-1 Calculation conditions	17
Table 3-2 Calculation conditions of DFT	21
Table 4-1 Number of calculations	25

1 序論	

### **1.1** 研究の背景

半導体は「産業のコメ」と呼ばれるほど現代社会には欠かせない存在となっており、高 性能化のための微細化が進められてきた.近年では微細化は限界に近づいており、変わっ て高積層化による性能向上が進められている.しかし高積層化に伴い歪みが蓄積し、内部 応力は増大する.これは内部の SiO<sub>2</sub> などの低誘電率の絶縁膜を変形させ、割れや剥離の原 因となっている.そこで絶縁膜の誘電率を低く抑えつつ、機械的強度を向上し、絶縁膜の 破壊を抑えることが求められている.本論文では SiO<sub>2</sub>の体積弾性率に着目する.

### 1.2 先行研究

本研究では絶縁膜として一般的な a-SiO<sub>2</sub>に不純物として炭素を加えた場合の構造や弾性 率について調べた.

Kaisheng ら [1]はマグネトロンスパッタリング法により a-SiOC 薄膜を作成し、ミクロ構造が均一な a-SiOC は高い強度と可塑性を有することを示した.

Peter [2]は第一原理計算により a-SiOC の体積弾性率を調べた結果,ある程度の炭素量 までは炭素量の増加に伴い体積弾性率も増加することがわかった.

宮崎 [3]は a-SiO2 に C, N, P を不純物として添加したときの構造と弾性率に対する影響 を調査した.結果いずれの場合でも体積弾性率は低下した.これについて C, P を添加し た場合では空隙の拡大が, N を添加した場合では 3 配位以下の Si の増加がそれぞれ体積弾 性率低下の主な原因であると考察している.

# 1.3 研究の目的および手法

宮崎[3]の研究では第一原理計算の一種である密度汎関数法を用いてシミュレーション を行なっている.これは計算コストが大きく、1ケースあたり10コアで10日かかってい る.また同一条件でもランダムに設定された原子の初期配置の違いによるばらつきが大き く、たとえば体積弾性率はおおよそ数割程度の差が生じている.

そこで、本研究では後述する深層学習を用いた分子動力学計算によって、SiO<sub>2</sub>に炭素 を添加したときの構造と弾性率への影響を明らかにすることを目的とする.これにより、 比較的良い精度で先行研究よりも多様な条件、多くの試行回数で解析ができることが期待 される.

# **1.4** 本論文の構成

本論文の構成を以下に示す.

#### 第1章「序論」

本研究の背景,従来の研究,および研究の目的を述べた.

#### 第2章「計算手法」

本研究では深層学習を用いた分子動力学法(MD 法)を行っている. そのためまず MD 法 の従来手法である第一原理計算, 古典 MD 法について説明する. その後, 深層学習及び深 層学習ポテンシャルを用いたシミュレーションサービスであり,本研究で使用した Matlantis [4]についても説明する.

#### 第3章「a-SiO2の構造とその妥当性」

本研究で作成した a-SiO<sub>2</sub>の構造の作成条件を述べる. また DFT の結果や実験値と比較し、構造の妥当性を確認する.

#### 第4章「炭素添加 a-SiO2 弾性率と構造の関係」

a-SiO<sub>2</sub>に量を変えてCを添加した構造を作成する.また,Oの量を変えて同様に構造を 作成する.気体生成数,リングに含まれない結合数,4配位未満のSiの数,体積弾性率を 計算し,結果について考察する.

#### 第5章「結論と今後の課題」

本研究の結論と今後の課題について述べる.

研究で用いた計算手法

# 2研究で用いた計算手法

本研究のような原子サイズのシミュレーションには分子動力学法(MD: Molecular Dynamics)が用いられる.分子動力学法はある時点での分子や原子の相互作用を考え,そこ から運動方程式により次の時点の分子や原子の座標を求めていくことで系の時間発展を求 めていく手法である.従来の手法は大きく分けて第一原理計算によるものと古典 MD 法に よるものに分かれる.また近年では本研究で用いたニューラルネットワークポテンシャル を使った手法も注目されている.それぞれについて説明する.

# 2.1 第一原理計算

第一原理計算とは量子力学の基本法則に基づいて対象の物質の電子状態を計算し、物性 を調べる手法である.次に紹介する古典 MD 法などと異なり、基本的な物性値以外は第一 原理(量子力学)のみに基づいており、経験的なパラメータなどを用いないためこのように 呼ばれている.これは原理的には系全体のシュレディンガー方程式を解くことによって計 算できるが、多電子系の場合、これは困難であるため様々な近似計算の手法が提案されて いる.その一つは密度汎関数理論(DFT: Density Functional Theory)に基づいた密度汎関数法 であり、これは電子密度からエネルギーなどを計算する手法である.

# 2.2 古典 MD 法

古典 MD 法においては電子状態を陽に考えることはせず,原子間ポテンシャルから原子の相互作用を求める.原子間ポテンシャルは2つ以上の原子間の結合距離,結合角,二体角などを引数とした関数として表現できる.この関数形は経験的に決定され,実験値など

に基づいてそのパラメータがフィッティングされる.量子的な効果を考慮しないため第一 原理計算よりも計算精度は低くなるが,計算コストは小さくなる.また多くの場合,特定 の構造に対してパラメータフィッティングが行われているため構造や元素種に関する汎用 性は低い.

# 2.3 深層学習

深層学習とは機械学習の一種であり、多層構造のニューラルネットワークを用いて対象 を学習する手法である.ニューラルネットワークは生物の神経を参考に作られており、個々 の神経細胞に対応するニューロンは他の複数のニューロンからの出力やバイアスを入力と して受け取り、それらを何らかの重み付けをして足しあわせた後、活性化関数を適用し次 の層の出力とする.ただし初めの層の入力は対象のデータとなり、最後の層の出力がニュ ーラルネットワーク全体の出力となる.学習段階では損失を最小化するように重みづけを 更新させる.

## 2.4 Matlantis

Matlantis とは株式会社 Preferred Computational Chemistry がクラウドサービスとして提供 する汎用原子間シミュレータである. Matlantis では PFP(PreFerred Potential) [5]を原子間ポ テンシャルとして用いて分子動力学計算を行う.

PFP について説明する. PFP はニューラルネットワークポテンシャルの一種である. 原 子系をグラフとみなし、グラフに対してニューラルネットワークを適用した. ただし個々

14

の原子はノードにあたり,原子間距離がカットオフ距離未満の原子の間にエッジが張られ る.学習にあたって,教師データには DFT 計算の結果を用い,エネルギーや原子間力など を学習した.

ポテンシャルとして PFP のような深層学習ポテンシャルを用いることで第一原理計算と 比較した際,電子状態を直接計算しないため計算コストが小さいというメリットがある. また一方で古典 MD 法と比較したとき, 古典 MD 法と異なり人がポテンシャルの関数形 式を決めていないため第一原理計算のような非経験的な手法のメリットも取り入れること ができ未知の原子系へも適用できることや,より良い精度が得られることが期待される. a-SiO2 の構造とその妥当性

# 3 a-SiO<sub>2</sub>の構造とその妥当性

# 3.1 a-SiO<sub>2</sub>の作成条件

アモルファス構造を作成する手法の一つであるメルトクエンチ法を用いて, Fig. 3-1 の ように温度を変化させ, この後 0 K で構造最適化を行なうことで a-SiO<sub>2</sub> 構造を作成した. 計算条件を Table 3-1 に示す. この時, 体積密度が 2.2 g/cm<sup>2</sup>で一定になるよう格子サイ ズを調整した. 前章で述べたように計算には Matlantis を利用し, 分子動力学計算ソフトと して Lammps を用いた.

作成した構造の一例を Fig. 3-2 に示す. 肌色が Si, 赤色が O を表す.



Fig. 3-1 Input temperature for melt quench calculation

Ensemble	NTV (Nosé-Hoover thermostat)	
Total number of steps	about 34200	
Time step	0.24 fs	
Initial placement	random	

Table	3-1	Calculation	conditions
raute	5-1	Calculation	conunions

2022 年度卒業論文 深層学習を用いた分子動力学計算による炭素を添加した非晶質シリカ の構造と機械特性の解明

Number of atoms	Si: 30 O: 60
Software	Matlantis / Lammps
Calculation time	2-4 hours



Fig. 3-2 Strucure of a-SiO<sub>2</sub>

# 3.2 作成した構造の妥当性

構造の動径分布関数,エネルギーについて実験値 [6]や DFT による計算値と比較した. いずれも Si が 30 原子, O が 60 原子で C を添加しない場合について比較した.

#### **3.2.1** 構造の動径分布関数

a-SiO<sub>2</sub>の動径分布関数について、各元素のペアごとに本研究の手法による計算値、古典 MD による計算値と実験値を比較した.ただし、計算値は平均をとっている.この構造の 中で存在する結合はほとんどが Si-O 結合であり、Si は 4 つの O と O は 2 つの Si と結合し ている.3種類の動径分布関数の第一ビークの大きさを比べると Si-O の値は他の O-O, Si-Si の値よりも大きい.これは Si-O には結合が存在するが、ほか二つの結合はほぼ存在しな いためであると考えられる.またいずれも計算値と実験値の傾向は一致しており、作成さ れた構造が実際の構造に近いことを示唆している.特に Si-O, O-O の第一ピークは距離、 動径分布関数の密度ともによく一致している.それ以外では全体として計算値の方がなだ らかな傾向がある.これは計算領域の格子サイズが 11Å程度と小さいため周期境界条件に より均されてしまっているのではないかと考えられる.

古典 MD の O-O の動径分布関数において 3Å付近で不自然な山がある.それ以外はおおよそ本手法と古典 MD で動径分布関数の違いは見られなかった.



Fig. 3-3 Pair distribution function between O and O in  $a-SiO_2$ 



Fig. 3-4 Pair distribution function between Si and O in  $a-SiO_2$ 



Fig. 3-5 Pair distribution function between Si and O in a-SiO<sub>2</sub>

### 3.2.2 構造のエネルギー

作成した構造に対して、本研究の手法および DFT 計算によって構造のエネルギーを計算 した. DFT 計算の計算条件は Table 3-2 であり、結果は Fig. 3-6 のようになった. 若干の エネルギーシフトはあるものの傾きなどは一致している. エネルギーシフトは Matlantis の 学習に用いた DFT の計算ソフト、計算条件がこの DFT 計算のものと異なることが原因で ある可能性がある.

Ensemble	NTV (Nosé-Hoover thermostat)
Total number of steps	about 25, 26
Time step	2.4 fs

Table 3-2 Calculation conditions of DFT

2022 年度卒業論文 深層学習を用いた分子動力学計算による炭素を添加した非晶質シリカの構造と機械特性の解明

Number of k points	1
Cutoff energy	435eV
Initial placement	random
Number of atoms	Si:30, O:60, C:0-9
Exchange-correlation functional	GGA-PBE (PAW)
Software	PHASE/0 2020



Fig. 3-6 Comparison of energies between DFT calculations and this work

# 3.3 本章の結論

動径分布関数を比較したところ,古典 MD との差はほとんど見られなかった.しかし古 典 MD の O-O では 3Å付近で実験値には存在しないピークが発生しており,この点におい て本手法は古典 MD よりも優れていると言える.またいずれにせよ動径分布関数の形状は 本手法と実験でおおよそ一致していた. エネルギーの比較においては DFT 計算と本手法の差はほとんどエネルギーシフトの計 算の部分で生じていた.原子に働く力はポテンシャルエネルギーの微分となるため分子動 力学計算においてエネルギーシフトのズレは問題にならないと言える.

これらの結果から本手法において,現実の構造を適切にシミュレーションできていると 考えられる.

# 4 炭素添加 a-SiO2 弾性率と構造の関係

# 4.1 炭素添加 a-SiO<sub>2</sub>の構造の特徴

第3章と同様の条件で炭素を添加し,酸素数を変化させた a-SiO<sub>2</sub>:C の構造を作成した. 各条件における計算回数を Table 4-1 に示す. Fig. 4-1 は実際に作成した構造の一例である. 結合種ごとの結合数の炭素数依存性を Fig. 4-2, Fig. 4-3 に示す.ただし,気体分子(CO, CO<sub>2</sub>) の結合は除いた.また結合数を体積で割り,正規化した.また同様に酸素原子,炭素原子 の量を変化させた時の発生した気体分子(CO, CO<sub>2</sub>)数,リングに含まれない結合数,4配位 以下の Si の数を Fig. 4-4, Fig. 4-5, Fig. 4-6 に示す.95%信頼区間を薄い色で示す.

以下これらの値を元に炭素添加 a-SiO<sub>2</sub>の構造の特徴を見る.

Number of O stome	40	50	60
Number of O atoms	40	30	60
Number of C atoms			
0	10	10	29
1	0	0	10
2	10	10	15
3	0	0	10
4	11	10	10
5	0	0	10
6	10	10	10
7	0	0	10
8	10	10	10
9	0	0	10
10	10	10	50
12	10	10	10
14	10	10	10
15	0	0	10
16	10	10	10
18	10	10	10
20	10	10	19
22	10	10	10

Table 4-1 Number of calculations

2022 年度卒業論文 深層学習を用いた分子動力学計算による炭素を添加した非晶質シリカ の構造と機械特性の解明

24	10	9	10
26	10	10	10
28	10	10	10
30	10	10	10



Fig. 4-1 Structure of a-SiO<sub>2</sub>:C (Si:30, O:60, C:10)

### 4.1.1 酸素原子数が 60 の場合

Cの添加量が0のとき、ケイ素:酸素が1:2となり、ほぼ全ての結合がSi-O結合となる. Cを添加していくと、添加量8程度を境に構造変化の傾向が変化する.添加量8未満では Cはおよそ半分がOと結合し気体(CO,CO<sub>2</sub>)となる(Fig. 4-4).その分Siは結合相手のOが 減り、4配位未満のSiの数は増加する.これはSiから見れば不安定な状態だが、この範囲 ではCがSiではなくOと結合することによる安定化が優先されていることがわかる.さ らに添加量を増やすと(≧8)気体の発生量はおよそ一定となる.これはこれ以上気体が生成 すると Si の配位数が減少しかえって不安定になるためだと考えられる.これにより結合の 中に取り込まれる C の割合が増える.

#### 4.1.2 酸素原子数が 40 の場合

Si の結合相手となる O は C を添加していない時点で大幅に不足しており Si-Si 結合も 多く存在し,4 配位未満の Si も多い.そのため添加された C はほぼ Si-C 結合をとり,気 体もほとんど発生しない.Cが増加すると C-C 結合も増加するが,全体として傾向は変わ らない.酸素原子数が 60 の場合と比較すると Si-O の結合の密度は初め 2 割程度小さいが C の量の増加に伴い差は小さくなっていく.Si-C 結合の密度は酸素原子数が 60 とは大き く開きがあり炭素数 30 で倍近く,より炭素の少ない条件ではより大きな差が生じている.

### 4.1.3 酸素原子数が 50 の場合

酸素原子数が 50 の場合の傾向は 40 の場合と 60 の場合の傾向のほぼ中間となっている.

27



Fig. 4-2 Additive amount dependence of number of bonds in a-SiO2:C



Fig. 4-3 Additive amount dependence of number of bonds without Si-O in a-SiO2:C



Fig. 4-4 Additive amount dependence of number of gas molecules



Fig. 4-5 Additive amount dependence of number of bonds not included in rings



Fig. 4-6 Additive amount dependence of number of Si less than 4-coordinate

# 4.2 炭素添加 a-SiO2の構造と体積弾性率の関係

Fig. 4-7 に炭素添加量と体積弾性率の関係を示す.酸素原子数が40,50,60 いずれの場合もばらつきは大きいが炭素添加量を増加させると体積弾性率も増加する傾向が見られる. また酸素量の減少に伴って体積弾性率が増加する傾向がある.



Fig. 4-7 Additive amount dependence of bulk modulus

体積弾性率と気体分子(CO, CO<sub>2</sub>)数, リングに含まれない結合数, 4 配位未満の Si の数 との関係を Fig. 4-8, Fig. 4-9, Fig. 4-10 に示す. Fig. 4-8, Fig. 4-9 より, 気体分子数やリン グに含まれない結合数などの結合のネットワークに取り込まれていない原子に関する値は 体積弾性率に影響を与えないことがわかる. 一方 Fig. 4-10 より 4 配位以下の Si の数と体 積弾性率には負の相関があることがわかる.

2022 年度卒業論文 深層学習を用いた分子動力学計算による炭素を添加した非晶質シリカの構造と機械特性の解明

4.1 とこれらの結果を比較すると Si-C 結合の密度が高いことが体積弾性率の増加に寄与 しているのではないかと推測できる.



Fig. 4-8 Relationship between bulk modulus and number of gas molecules



Fig. 4-9 Relationship between bulk modulus and number of bonds not included in rings



Fig. 4-10 Relationship between bulk modulus and number of Si less than 4-coordinate

# 5 結論と今後の課題

# 5.1 結論

3章で作成したアモルファス構造は、古典 MD による計算と同様な構造であり、DFT 計 算や実験値とも一致するため、妥当な構造ができていると判断した。

4 章では炭素や酸素の量を変化させ,またそれぞれ複数回シミュレーションを行い構造 と体積弾性率の関係を調査した.Si30原子,O60原子,C0原子を基準の状態としたとき, それよりも炭素を増加させた場合,酸素を減少させた場合で体積弾性率は増加した.分析 の結果,結合のネットワークに取り込まれていない原子が体積弾性率に与える影響は少な く,Si-C結合が豊富に存在する,Siが4配位をとっているなどの安定なネットワークの場 合に体積弾性率を増加させるということがわかった.

# 5.2 今後の課題

妥当な構造を作成することは確認したが,第一原理計算を用いた手法でも同様の結果が 出ることは保証されていない.

同一条件においても数割程度異なった体積弾性率が生じている.これはモデルサイズが 70-120原子と小さいことが原因の一つである可能性がある.モデルサイズを大きくするこ とで非本質的な構造の違いによる体積弾性率への影響が相殺されより有意義な考察ができ る可能性がある.

6 三射古当	
	-

謝辞

36

本研究を進めるにあたり、多くの方に多大なご協力をいただきました。厚く感謝いたし

ます。

泉教授にはテーマの選定や研究の進め方などご指導いただきました.

榊間助教には研究の進め方から論文の執筆に関することまで幅広くご指導いただきま

した.

2023年1月

小川 京悟

# 7 文献目録

- K. Ming, C. Gu, Q. Su, Y. Wang, A. Zare, D. A. Lucca, M. Nastasi and J. Wang, "Strength and plasticity of amorphous silicon oxycarbide," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 516, pp. 289-296, 2019.
- Peter Kroll, "Modelling and simulation of amorphous silicon oxycarbide," J. Mater. Chem., vol. 13, no. 7, pp. 1657-1668, 2003.
- [3] 宮崎桜子, "電子状態計算による不純物を添加した非晶質シリカの構造と機械特性の解明,"東京 大学大学院工学系研究科修士論文, 2022.
- [4] "Matlantis, software as a service style material discovery tool," [オンライン]. Available: https://matlantis.com/.
- [5] S. Takamoto, C. Shinagawa, D. Motoki, K. Nakago, W. Li, I. Kurata, T. Watanabe, Y. Yayama, H. Iriguchi, Y. Asano, T. Onodera, T. Ishii, T. Kudo, H. Ono, R. Sawada, R. Ishitani, M. Ong, T. Yamaguchi, T. Kataoka, A. Hayashi, N. Charoenphakdee and T. Ibuka, "Towards universal neural network potential for material discovery applicable to arbitrary combination of 45 elements,," *Nature Communications*, vol. 13, no. 1, p. 2991, 2022.
- [6] J. Wang, A. M. Rajendran and A. M. Dongare, "Atomic scale modeling of shock response of fused silica and α-quartz," *Journal of Materials Science*, vol. 50, no. 24, pp. 8128-8141, 2015.