

ニューラルネットワークを用いた 多元酸化物界面のダイポールモーメントの予測

Prediction of Dipole Moments at Multicomponent Oxide Interfaces by Neural Network Model

○中根 滉稀¹, 富田 基裕^{1,2}, 渡邊孝信¹
(早大理工¹, 学振特別研究員 PD²)

○K. Nakane¹, M. Tomita^{1,2} and T. Watanabe¹
(Waseda Univ.¹, JSPS Research PD²)

E-mail: nakane_kouki@watanabe.nano.waseda.ac.jp

【研究背景】

近年、計算シミュレーションや実験結果で得られる大量のデータに基づいて新材料開発の指針を見出す「マテリアルインフォマティクス」の取り組みが活発化し、機械学習への注目が集まっている。当グループでは、機械学習の一つであるニューラルネットワーク (NN) の予測能力が、物理モデルに基づく従来の計算科学の予測能力を超える可能性があるか調査している。単元酸化物同士の界面ダイポールは、酸素原子密度差モデル^[1]によってその方向と大きさがある程度予測可能であるが、多元 High-k 酸化膜の界面では系統的に予測できるモデルが確立されていない。NN の予測能力が評価されることで材料開発のスピードが向上する可能性がある。前回、High-k/SiO₂ 界面で生じる分極を再現する分子動力学(MD)シミュレーション^[2,3]で得られるデータを用いて、NN による学習能力があることを報告した^[4]。今回は、単元系、二元系、三元系酸化物の界面ダイポールの MD 計算データを学習した NN で、未学習の四元系酸化物の界面ダイポールの予測が可能か評価した。

【シミュレーションおよび NN の方法】

Al、Mg、Sr、Ti の4種類の金属元素を混合した様々な組成の High-k 酸化物を用意し、これを SiO₂ と接続させて MD 計算(Fig.1 参照)を実施し、界面におけるイオンの偏移動によって生じるダイポールモーメントを計算した。この MD 計算で得られたデータを Fig2.に示す4層構造の NN モデルで学習させた。MD 計算で得られた結果のうち、Table1 の通り、単元系、二元系、三元系酸化物の学習データ、四元系酸化物のデータを予測データとし、学習完了後、それぞれを NN に入力し、MD 計算の結果と比較した。

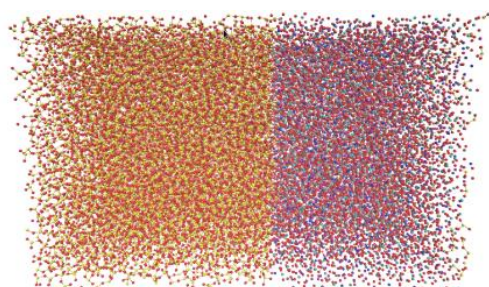
【結果および考察】

Fig.4 に、MD 計算で得られたダイポールモーメントと、NN で学習・予測させたダイポールモーメントの相関図を示す。学習データに対する相関係数 $r = 0.863$ となっており NN が MD 計算結果の学習に成功していることが分かる。また、予測データに対する相関係数 $r = 0.723$ と高く、未学習の四元系酸化物のデータと予測値の間にも、強い相関があることが確認できた。これは、NN が学習中に材料の組成とダイポールモーメントから各材料の特徴を見出し、未学習の四元系酸化物のデータを外挿的に予測する能力を獲得したことを示唆している。

【謝辞】本研究は科学研究費補助金・基盤研究(B)(15H03979)の支援を受けて行われた。

【参考文献】 [1] K. Kita et al., APL 94, p.132902 (2009). [2] R. Kuriyama, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 53, 08LB02 (2014). [3]

K. Shimura, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 55, 04EB03 (2016). [4] 中根滉稀 他, 応用物理学会秋季学術講演会, 15p-B2-10 (2016).



(Al:Mg:Sr:Ti = 2:1:1:1)

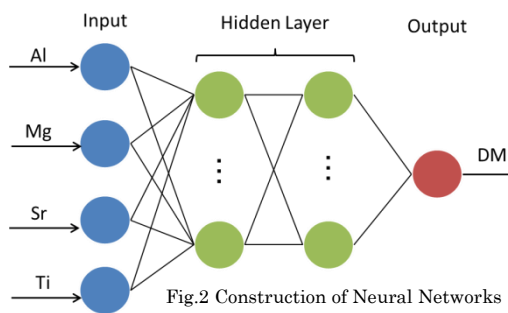


Fig.2 Construction of Neural Networks
(10 nodes in each Hidden Layer)

Table1 Example of Dataset

入力				MD計算値
Al	Mg	Sr	Ti	DM[C·cm]
4	1	0	5	-4.71E-20
3	0	4	1	-3.01E-19
0	3	1	4	-2.28E-19
4	7	1	0	-1.99E-19
1	4	2	5	-6.92E-19

Train Data Test Data

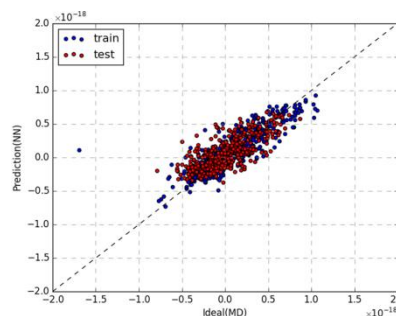


Fig.4 Result of Neural Networks

(Blue plot : Train data , Red plot : Test data)