四面体型半導体の誘電率の線形回帰分析

Linear Regression Analysis of Dielectric Constants of Tetrahedral Semiconductors

九工大院情報工　有馬 幹尋，淵 雅也，°前田 佳均

Dept. of Information Eng., Kyutech, Mikihiro Arima, Masaya Fuchi, °Yoshihito Maeda

E-mail: maeda@cse.kyutech.ac.jp

【はじめに】マテリアル・インフォマティックス(Materials Informatics : MI)は，物質・材料の物性・特性を既存データから統計的手法でモデル化し，それによって未知の物性・特性を推測する情報工学である [1]．MI では，ある物質母集合の特定の物性・特性 Y（目的変数）に相関する物理量：記述子$\{x_i\}$を用いて最尤統計モデル $Y=F(\{x_i\})$の構築を行う．本研究では，統計母集合に 28 種の四面体型半導体の誘電率（ε）[2]を対象として，一般化線形回帰（GLM）から ε の最尤統計モデルを検討した．

【解析方法】GLM に必要な R 言語スクリプトパッケージを CRAN ホームページ[3]から入手して編集し，回帰分析に用いた．

【結果】 目的変数 $Y=\varepsilon$ の記述子$\{x_i\}$には，ハリソン[2]によって与えられた半導体の原子価結合法(LCAO)のパラメータ：核間距離 (d)，共有エネルギー(V_2)，極性エネルギー(V_3)，共有度（α_c），金属度（α_m）を用いた．Fig.1 にこれらの記述子を用いた GLM 解析の結果を示す．縦・横軸は標準化した実測とモデルから予測される ε の対応を示している．赤池情報量規準（AIC）が最小となる最尤度の線形回帰式として

$$\varepsilon = 0.73d + 0.89\,V_2 + 1.02\,\alpha_m$$

が得られた．LCAO の理論[2]では，近似式として$\varepsilon \sim d^2 V_2 \alpha_m^2$で与えられている．本研究で得られた線形回帰式のそれぞれの記述子の係数は正値であるので ε に対する増減（正・負）相関は，理論式と一致している．

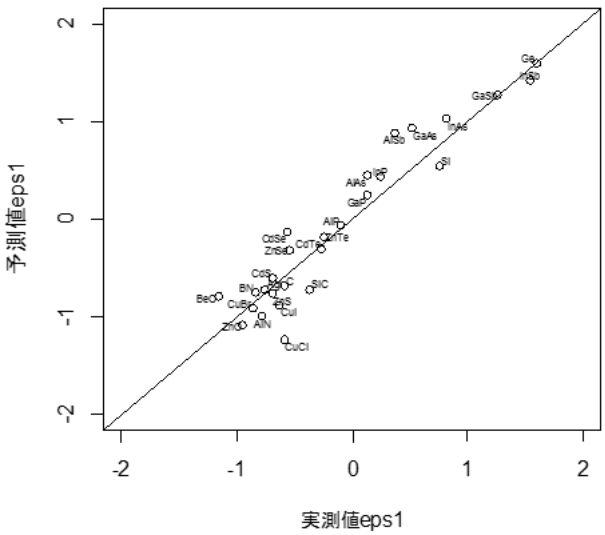

Fig.1 Result of linear regression using GLM for standardized ε of 28 semiconductors with a tetrahedral coordination.

【参考文献】

[1] K. Rajan *ed.*: Informatics for Materials Science and Engineering. Butterwoerh-Heinemann, 2013, Amsterdam.

[2] W. A. ハリソン：固体の電子構造と物性，現代工学社，1983.

[3] CRAN Homepage, https://cran.r-project.org/web/packages/MCMCpack/index.html