Si/SiO2 界面解析に向けたニューラルネットワークポテンシャルの応用

Neural network potential for Si/SiO2 interface

名大院工 [1]，名大未来研 [2]　°又賀 誠 [1]，名倉 拓哉 [1], 洗平 昌晃 [2,1], 白石 賢二 [2,1]

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.[1], IMaSS, Nagoya Univ.[2],
°Mataka Makoto[1], Nagura Takuya[1], Masaaki Araidai[2,1], Kenji Shiraishi[2,1]
E-mail: mataka.makoto@j.mbox.nagoya-u.ac.jp

１．はじめに

化学反応等の電子を介する現象の精密な解析には、密度汎関数法に基づく第一原理計算を用いるのが一般的である。しかしながら、第一原理計算は計算負荷が非常に大きいため、大規模システムの計算や長時間シミュレーションを実行するのは容易ではない。一方、経験的ポテンシャルは非常に高速にエネルギー等を計算できるものの、一般に汎用性が低く、また、その作成は時間がかかるプロセスであり、一筋縄ではいかない。近年、非常に高い自由度を有するニューラルネットワーク（NN）を用いて原子間の相互作用をモデリングする手法が注目されている[1, 2]。

そこで、本研究では Si/SiO2 界面における汎用性の高いポテンシャルを系統的に作成し、Si/SiO2 界面の熱酸化シミュレーションを行うことで新規デバイスの研究開発の進展の手助けとなることが目標である。

２．ポテンシャルの作成手順

機械学習の入力データとして系に含まれる各原子の座標を用いることが考えられるが、ある粒子数に対して最適化された NN ポテンシャルは異なる粒子数に対しては使用できず、また、同一原子種の粒子を入れ替えた際の結果が異なり、対称性が保証されない。そのため、原子座標を直接用いるのではなく、各原子の局所的環境を表現する「対称関数」を導入する [1, 2]。これにより原子数の違う系にも適用が可能となるため、原理的には少数原子系で学習したポテンシャルを大規模系に応用することができる。

訓練データの作成には密度汎関数法（DFT）に基づく第一原理計算コードである Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)[3]を用いた。また、機械学習ライブラリとして TensorFlow を用いた。Si/SiO2 界面モデルに対して、200K から 4000K までの様々な温度領域における分子動力学計算を実行し、それらのデータをもとに学習を行い、NN ポテンシャルを作成した。

３．結果と考察

図１に NN ポテンシャルの精度を端的に表す回帰プロットを示す。縦軸は DFT によるエネルギー、横軸は NN ポテンシャルによるエネルギー、点はテストデータとして用意された構造の分だけある。低温領域では DFT によるエネルギーとの十分な一致が見られるが、高温領域ではばらつきが大きくなっていることがわかる。これは、高温領域では低温領域よりもエネルギーの分散が大きいにもかかわらず、学習には各温度から同一のデータ数を採用したことに起因する。講演では、学習データの準備の仕方を工夫することでこの問題が解決されることを示す。また、対称関数のパラメータや NN ポテンシャルのハイパーパラメータの最適化などによって、NN ポテンシャルの精度がどう改善するかについても報告する．さらに，Si/SiO2 界面の熱酸化過程におけるミクロなプロセスに適用した結果についても報告する予定である。

本研究は JST-ACCEL「縦型 BC-MOSFET による三次元集積工学と応用展開」（研究代表者：遠藤哲郎）の助成を受けて実施した。

Reference

[1] J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. **98**, 146401 (2007).
[2] N. Artrith, B. Hiller, and J. Behler, Phys. Status Solidi B **250**, 1191-1203 (2013).
[3] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).

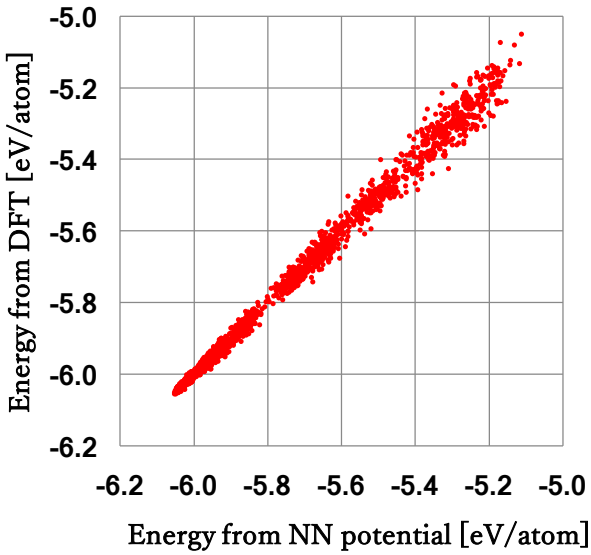

Fig.1 Energy prediction of Si/SiO_2 interface model. The figure is the regression plot by the structure data not used in training.