

フォノン物性や電場中の原子ダイナミクスの解析に向けた ニューラルネットワークポテンシャルの構築

Construction of Neural Network Potentials to Analyze Atom Dynamics under Electric Fields and Phonon Properties

東大工¹, 産総研 CD-FMat², 物材機構 MaDIS³ 小倉 正義¹, 守屋 孝紀¹, 李 文文²,
清水 康司¹, 南谷 英美¹, ○渡邊 聡^{1,3}

UTokyo¹, AIST², NIMS³, Masayoshi Ogura¹, Takanori Moriya¹, Wenwen Li²,

Koji Shimizu¹, Emi Minamitani¹, Satoshi Watanabe^{1,3}

E-mail: watanabe@cello.t.u-tokyo.ac.jp

[緒言]:機械学習と第一原理計算データを基に計算の信頼性と高速性を並立させた原子間ポテンシャルを構築する研究が最近盛んである。我々のグループでも、ニューラルネットワークを用いた原子間ポテンシャル(NNP)[1]でアモルファス Li_3PO_4 中の Li 拡散挙動の高信頼性予測に成功した[2]。しかし、パワー半導体中の発熱等で重要なフォノン物性や、電池や新規記憶素子[3]で重要な電場下の原子移動の解析には、従来の NNP は不十分である。本研究では、これら 2 つの課題の解決に向けた取り組みを報告する。

[方法]: (1) フォノン物性については、ポテンシャルエネルギー面の高次微分を精度よく推定するため、従来法で NNP の学習に用いる全エネルギーだけでなく、各原子に働く力の第一原理計算結果も学習データに含めて NNP を構築した。(2) 電場下の原子移動挙動については、原子に働く力の電場による変化の評価に原子電荷が決定的に重要である。我々は、アモルファス Li_3PO_4 において各原子のボルン有効電荷が局所原子配置と強い相関を持つことを見出したことを踏まえ、ボルン有効電荷の第一原理計算結果を推定する NN を構築した。

[結果]: (1) 図 1 に示すように、ウルツ鉱構造の GaN 結晶のフォノン分散の第一原理計算結果を構築した NNP はよく再現できた。発表ではこの NNP を用いた熱伝導率計算についても報告する。

(2) アモルファス Li_3PO_4 中の各原子のボルン有効電荷の第一原理計算結果を再現できる NN の構築に成功した。発表では、これを用いた電場印加下分子動力学計算の結果も報告予定である。本研究は JST-CREST、JST イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」、科研費基盤研究 (B)・新学術領域研究「特異構造の結晶科学」の支援を受けた。

[1] J. Behler et al., Phys. Rev. Lett. **98**, 146401 (2007); [2] W. Li et al., J. Chem. Phys. **147**, 214106 (2017);

[3] I. Sugiyama et al., APL Mater. **5**, 046105 (2017).

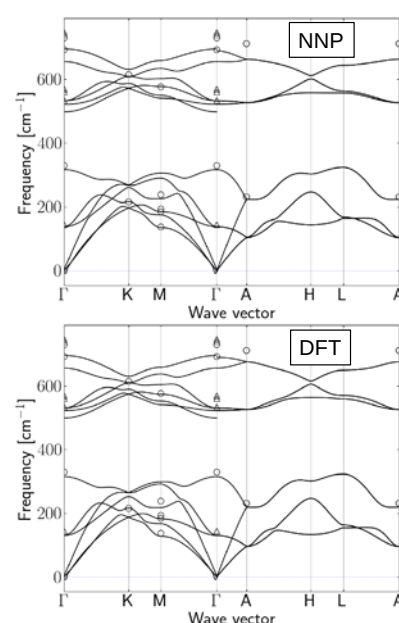


図 1: NNP と第一原理計算 (DFT) による GaN フォノンバンドの計算結果。○、△は実験値。