Au(111)/Li_3PO_4の界面構造探索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 Potential to Explore Au(111)/Li_3PO_4 Interface Structures

東大工[1], 産総研[2], 物材機構[3] ○清水 康司[1], Wei Liu[1], Wenwen Li[2], 安藤 康伸[2], 南谷 英美[1], 渡邊 聡[1,3]

UTokyo[1], AIST[2], NIMS[3], °Koji Shimizu[1], Wei Liu[1], Wenwen Li[2], Yasunobu Ando[2], Emi Minamitani[1], Satoshi Watanabe[1,3]

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

[緒言]: 全固体リチウムイオン電池[1]や新規不揮発性メモリ[2]としての応用が検討されている Au (Ni)/Li_3PO_4/Li 積層構造では、電極−電解質界面近傍における Li イオン分布がその動作機構において重要となる。これらのデバイスの動作原理の解明には界面構造の微視的な理解が不可欠である。近年、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)が考案され[3]、計算の精度と速度を両立する手法として注目されている。また、本手法を用いて、訓練データよりも大きなセルサイズにおいてアモルファス Li_3PO_4 を精度よく計算できることが示されている[4]。以上を念頭に、本研究では、NNP を用いた Au/Li_3PO_4 界面系に対する原子間ポテンシャルの構築を行った。

[方法]: 4 元系(Au−Li−P−O)NNP の作成には、密度汎関数理論に基づく第一原理計算で得られたエネルギーと構造を使用した。データセットには、Au と Li_3PO_4 のバルク構造と表面構造、Li 原子が吸着した Au 表面構造、さらに Au(111)/Li_3PO_4 界面構造を考慮した。各原子の周囲の局所的な原子環境を記述する対称性関数[3]を NNP の入力値として使用し、カットオフ距離には 7 Åを用いた。

[結果]: 構築した 4 元系 NNP のエネルギー予測に対する平均二乗誤差は、訓練データでは 41.3 meV/atom、テストデータでは 41.4 meV/atom となった。ここで用いたネットワーク構造は各原子種ごとに、入力層 252 ノード、隠れ層 2 層（各層 9 ノード）、出力層 1 である。次に、NNP の構築を高速化するための取り組みとして、従来のネットワーク構造とは少し異なった方法で Au/Li_3PO_4 界面系の NNP の構築を行った。まず、Au と Li_3PO_4 のそれぞれに対する NNPs を構築した。次に、Au/Li_3PO_4 界面系の NNP を作成する際に、上記の Au と Li_3PO_4 のそれぞれに対する NNPs を使用し、さらに、Au−Li、−P、−O 間の相互作用を含むネットワークを新たに構築することで 4 元系の NNP を作成した。これら 2 通りのネットワークの構築方法において、同等のエネルギーの予測精度が得られた。さらに、後者の方法では、ネットワークの最適化に要する時間が短縮できることを示した。本研究は JST、CREST の支援を受けたものである。

[1] M. Haruta et al., Nano Lett. **15**, 1498 (2015).

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

[3] J. Behler et al., Phys. Rev. Lett. **98**, 146401 (2007).

[4] W. Li et al., J. Chem. Phys. **147**, 214106 (2017).

© 2019年 応用物理学会