

機械学習ポテンシャルを用いた窒化物半導体特異構造の研究： 構造、フォノン、熱物性

Study on Nitride Semiconductor Singularity Structures Using Machine-Learning

Potentials: Structures, Phonon and Thermal Properties

東大工¹, 分子研² ◯渡邊 聡¹, 清水 康司¹, 南谷 英美²

UTokyo¹, IMS² Satoshi Watanabe¹, Koji Shimizu¹, Emi Minamitani²

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

【緒言】：原子構造や物性を信頼性高く予測できる第一原理計算は、計算負荷が大きくなるため特異構造への適用は難しいことが多い。この場合、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が有効と期待される。そこで我々はこの方法論を窒化物半導体に適用し、特異構造が熱物性等の諸物性に及ぼす影響の解析を目指して研究を進めている。本講演では我々の研究の現状を紹介し、この方法の可能性を議論したい。

【方法】：高次元ニューラルネットワークを用いた原子間ポテンシャル（HDNNP）の構築法[1]を採用した。様々な原子配置に対して密度汎関数法（DFT）計算したデータ（全エネルギーおよび各原子に働く力）を再現するように機械学習した。なお、特異構造周辺の原子についても高い信頼性が得られるよう、データサンプリングや機械学習の方法にいくつか工夫をしている。

【結果】：N 原子空孔を 1 個含むウルツ鉱型 GaN 結晶モデル（Ga₁₆N₁₅）を用いて作成した HDNNP で [001] 方向の熱伝導率を計算した結果を図 1 に示す。無欠陥の場合に熱伝導率の DFT 計算結果を再現できることは既に報告したが[2]、N 原子空孔の導入により熱伝導率が大きく低下する様子を確認できた。講演では、HDNNP の信頼性や現実的な空孔密度での熱伝導率計算に向けた課題と展望を議論する他、AlN/InN 界面等についての予備的な結果も紹介し、HDNNP による窒化物半導体特異構造の研究の今後の展望を議論したい。

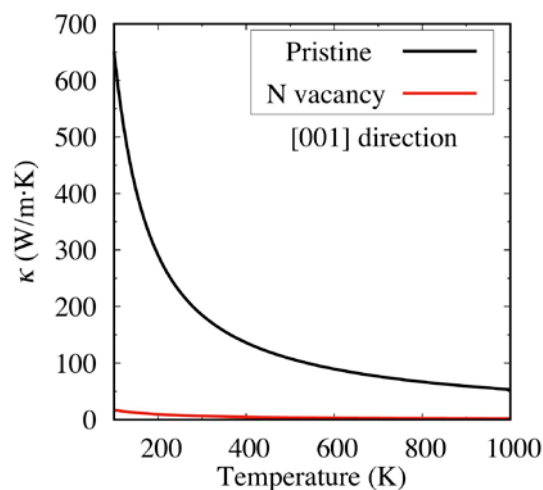


図 1：HDNNP による GaN 結晶の [001] 方向の熱伝導率計算結果。欠陥無し（黒線）および N 原子空孔あり（赤線）の場合。

本研究は、小倉正義（元 東大院工）、森谷拓海（元 東大工）、奥川真一（分子研）、寶穎（東大院工：藤岡研（東大生研））らとの共同研究を含む。また、科研費新学術領域研究「特異構造の結晶科学」・基盤研究 (B)、JST さきがけ、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」の支援を受けた。

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

[2] E. Minamitani et al., Appl. Phys. Express **12**, 095001 (2019).