機械学習ポテンシャルを用いた窒化物半導体の研究
ーフォノン・熱物性を中心にー

Study on Nitride Semiconductors Using Machine-Learning Potentials
— Focusing on Phonon and Thermal Properties —

東大工[1]，物材機構 MaDIS[2]，分子研[3] ○渡邉　聡[1,2]，小倉　正義[1]，清水　康司[1]，南谷　英美[3]

UTokyo[1], NIMS MaDIS [2], AIST[3]

Satoshi Watanabe[1,2], Masayoshi Ogura[1], Koji Shimizu[1], Emi Minamitani[3]

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

[緒言]：第一原理計算は原子構造や物性を信頼性高く予測できるが、窒化物半導体において重要な欠陥の影響の解析は、大きな計算モデルを要するため計算負荷が大変高い。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、欠陥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。まだ欠陥系の物性への適用には至っていないが、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て原子間ポテンシャル(HDNNP)を構築する方法[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。

[結果]：ウルツ鉱型 GaN 結晶について、DFT 計算との二乗平均平方根誤差がエネルギーに対し約 70meV/原子、力に対し約 40meV/Åの HDNNP を作成した。この HDNNP を用いてフォノンバンド構造と熱伝導率を計算した結果、DFT 計算と良い一致を得た。図 1 に熱伝導率の比較を示す[2]。面内（(100) 方向、左図）と面外（(001 方向)、右図）の異方性も含め、広い温度で DFT 計算結果と良い一致を示していることがわかる。講演では、点欠陥による構造緩和、欠陥含有結晶の熱伝導率、異種窒化物半導体界面構造等についての予備的な結果も紹介し、今後の展望を議論したい。

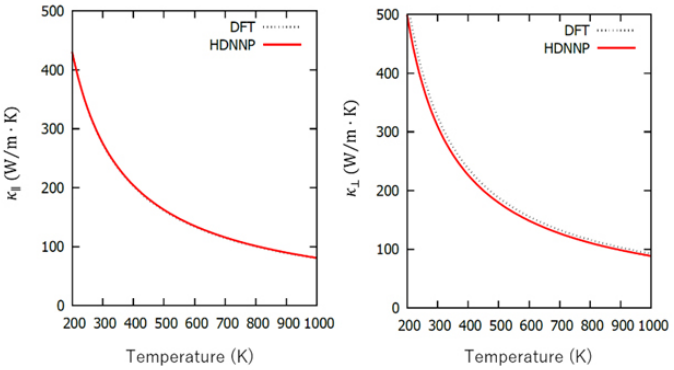

図 1：DFT と HDNNP によるウルツ鉱型 GaN 結晶の熱伝導率の計算結果[2]。左：面内（100）方向、右：面外（001）方向。

本研究は、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).

© 2020年 応用物理学会