

強相関係誘電特性の第一原理計算と機械学習

First principles calculations and machine learning for dielectric properties in strong correlated materials

三重大院工 〇(M2) 松本 崇宏, 名和 憲嗣, 中村 浩次

Mie Univ., 〇Takahiro Matsumoto, Kenji Nawa, Kohji Nakamura

E-mail: 420M613@m.mie-u.ac.jp

近年、ニューラルネットワークをはじめとする機械学習を用いた材料設計が盛んに行われるようになり、密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算と組み合わせることで複雑な物性の理解や新材料・デバイス開発がさらに加速化すると期待される。本研究では、機械学習による強相関係誘電特性の解析を進めている。しかし、第一原理計算において、その定量化にはいくつかの課題が残されている。例えば、大規模複雑系に適用可能なハバードモデル+U 法では、モデルパラメータである有効クーロン相互作用パラメータ (U_{eff}) の値やバンド間遷移に伴う緩和時間 ($1/\tau$) を実験結果に最適化させる必要がある。従って、これら複数の任意パラメータの信頼性を高めることが本手法の重要な鍵となっている。

この課題を解決することを目的に、我々はニューラルネットワークと第一原理計算を併用し、実験で測定された誘電関数スペクトル[1]から $1/\tau$ 及び U_{eff} を同時最適化するアプローチを試みた。本研究ではケーススタディとして、典型的な強相関電子系のひとつである反強磁性体 NiO に注目した。第一原理計算には全電子フルポテンシャル線形化補強平面波 (FLAPW) 法[2]を用いた。

はじめに、訓練データとして $1/\tau$ と U_{eff} を変化させたときの FLAPW 計算から、500 個の誘電関数スペクトルを準備した。次に、得られた誘電関数スペクトルを 3 層全結合型ニューラルネットワークに入力し、 $1/\tau$ 、 U_{eff} との関係を学習させた。ここでは、入力層と中間層のノード数をそれぞれ 200 と 100 とし、活性化関数には ReLU (Rectified Linear Unit) 関数を採用した。最後に、ニューラルネットワークに実験の誘電関数を入力し、実験結果を最適に表現する $1/\tau$ と U_{eff} を算出した。計算の結果、それぞれ 0.38 eV と 6.1 eV が得られた。また、決定係数が 0.845 と 0.977 であることから、定量的な学習・予測が実現されていることを確認した。発表では、NiO のバンド構造を含め、詳細な結果を報告する。

[1] R. J. Powell and W. E. Spicer, Phys. Rev. B **2**, 2182 (1970).

[2] K. Nakamura *et al.*, Phys. Rev. B **75**, 205205 (2007).