

ANN ポテンシャルを用いた Si 結晶中の格子間 Si クラスターの理論計算(2)

Calculation of interstitial Si clusters in Si crystal using ANN potential (2)

岡山県大院情報系工¹, 名古屋大院工², 金沢学院大経済情報³, 岡山県大情報工⁴○(M1) 大櫃万聖¹, 横井達矢², 野田祐輔³, 神山栄治⁴, 後口拓登¹, 永倉大樹¹, 末岡浩治⁴Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Graduate School of Engineering,Nagoya Univ.², Kanazawa Gakuin Univ.³, Okayama Pref. Univ.⁴°M. Ohbitsu¹, T. Yokoi², Y. Noda³, E. Kamiyama⁴, T. Ushiro¹, H. Nagakura¹, K. Sueoka⁴

E-mail: obitsu1007@gmail.com

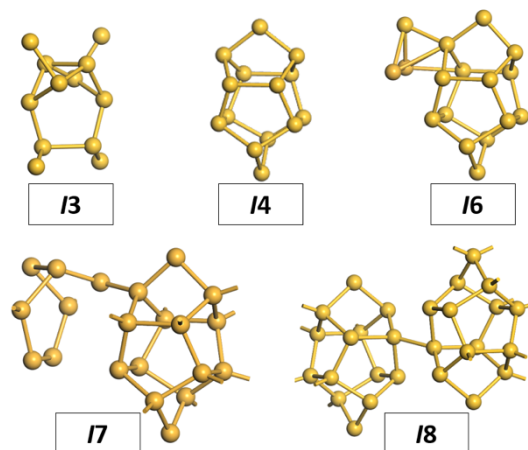
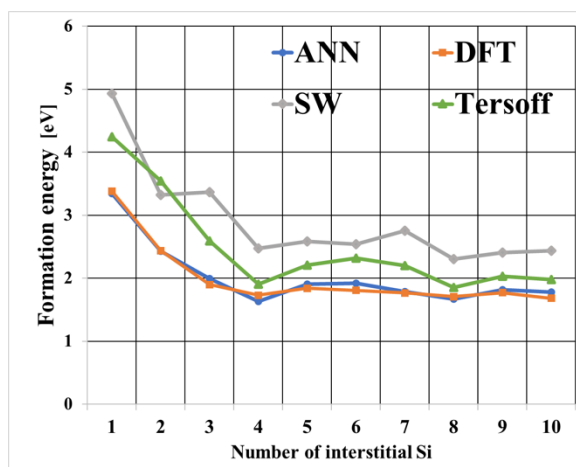
前回, 我々は格子間 Si 原子 (I) の凝集に伴う I クラスターの形成と, それが Extrinsic 型積層欠陥 (SF) へと至る過程の解明を目的として, 密度汎関数法 (DFT) の結果を学習データとして用いた格子間 Si クラスターの分子シミュレーション用 ANN (Artificial Neural Network) ポテンシャルを作成した[1]. しかし, 最近報告されている機械学習型ポテンシャル[2]と比較して, 学習データとの誤差が大きい課題があった.

今回, ANN ポテンシャルの精度向上を目的として, 学習データと学習方法の改善を行った. さらに, 図 1 に一部を示す DFT による先行研究[3]で見出されている I と $I_2 \sim I_{10}$ クラスターや, DFT で計算可能なモデルサイズの SF 等に対して, ANN ポテンシャルによる構造とエネルギーの再現を試みた結果を報告する. なお, 図 1 には I クラスターとその周囲のよく動いた原子を示す.

まず, 作成した ANN ポテンシャルを用いて, DFT で得られた学習データと比較した系のエネルギーと原子に加わる力の平均絶対誤差(MAE: Mean Absolute Error)を算出した. 系のエネルギーの MAE は 4.0 [meV/atom]であり, 原子に加わる力の MAE は 72.52 [meV/Å]であった. これより, 作成した ANN ポテンシャルはモデルの全エネルギーと各原子に働く力を DFT に準ずる精度で予測可能と言える.

次に, I と $I_2 \sim I_{10}$ クラスターについて, DFT で最安定構造とエネルギーを求め, その構造について ANN ポテンシャルで構造最適化を行った. 得られた構造は DFT の結果を再現し, さらに図 2 に示すように, I クラスターを構成する Si 原子 1 個当たりの形成エネルギーも DFT と定量的により一致を示した. これより, 今回構築した ANN ポテンシャルは, I クラスターについて高い精度で計算が可能であることが分かる. なお, 図中には古典的分子動力学法 (SW と Tersoff ポテンシャル) の結果も示しているが, いずれの形成エネルギーも ANN ポテンシャルと DFT よりも高いことがわかる.

なお, SF モデルについても計算を行っているが, その結果については当日報告する.

Fig. 1 Most stable I -clusters confirmed by DFT [3].Fig. 2 Formation energies of I and $I_2 \sim I_{10}$ clusters obtained by ANN potential.

参考文献

- [1] 大櫃他, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 11p-Z12-8 (2020).
 [2] Yokoi *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* **4** (2020) 014605.
 [3] Lee and Hwang, *PRB* **77** (2008) 085210.

謝辞

グローバルウェーブ・ジャパン株式会社の前田進様に有益な議論をして頂きました. 本研究は JST-CREST(Grant No. JPMJCR17J1)の支援を受けました.