機械学習ポテンシャルを用いた Cu_2Se の熱伝導解析

Numerical Analysis of Cu_2Se Thermal Conductivity Using Machine Learning Potential

東大工[1]　○(D)濱川 登夢[1]，塩見 淳一郎[1]

Univ. of Tokyo[1], ○Tomu Hamakawa[1], Junichiro Shiomi[1]

E-mail: hamakawa@photon.t.u-tokyo.ac.jp

Cu_2Se は 1000 K で ZT=1.5 という高い熱電性能を示す[1]材料である．その高い熱電特性には高温における非常に低い熱伝導率[1]が寄与している．Cu_2Se の低い熱伝導率は，固体内における Cu イオンの激しい振動特性に依存している．高温において Cu_2Se は固体状態のまま銅イオンのみが fcc 構造を成すセレンの間を hopping 伝導し，それによりフォノン輸送が疎外され低い熱伝導率を示す[1,2]．このような，フォノン輸送については liquid 的で電子については crystal 的な特性を持つ材料が，”Phonon-liquid electron-crystal(PLEC)”というコンセプトのもと，高性能な熱電材料として探索されている．

PLEC 材料は，その”liquid-like”な特性からフォノン伝導について摂動論的に取り扱うことが難しく，計算負荷の重い第一原理分子動力学法による熱伝導解析が求められる．一方，熱伝導率の数値計算において，機械学習ポテンシャルを用いた研究例が近年増えてきている[3,4]．機械学習ポテンシャルは，機械学習を用いて原子間ポテンシャルを近似することで，第一原理計算程度の精度は保ちながら計算量を経験的ポテンシャル程度に抑えることを目指して開発されたポテンシャルであり，Neural Network を用いた Beheler-Parrinello 型ポテンシャル[5]などがその代表である．

本研究では，スパースガウス過程回帰を利用した機械学習ポテンシャル[6]を用いて Cu_2Se の原子間ポテンシャルを構築し，フォノン特性や熱伝導率について解析した．それにより，第一原理分子動力学法と比較した計算量の低減の度合いや，正確性を評価した．結果の一つとして，分子動力学法から計算した振動状態密度を先行研究[7]の第一原理分子動力学法および実験値の結果と比較したものを図 1 に示す．

【参考文献】

[1] Huili Liu, et al., *Nat. Mater.*, **11**, 422–425, 2012.

[2] Hyoungchul Kim, et al., *Acta Mater.*, **86**, 247–253, 2015.

[3] R. Li, et al., *Mater. Today Phys.*, **12**, 100181, 2020.

[4] Pavel Korotaev, et al., *Phys. Rev. B*, **100**, 144308, 2019.

[5] Jörg Behler, et al., *Phys. Rev. Let.*, 98, 146401, 2007.

[6] Amir Hajibabaei, et al., *Phys. Rev. B*, **103**, 214102, 2021.

[7] S. Md Kazi Nazrul Islam, et al., *Acta Mater.*, **215**, 117026, 2021.

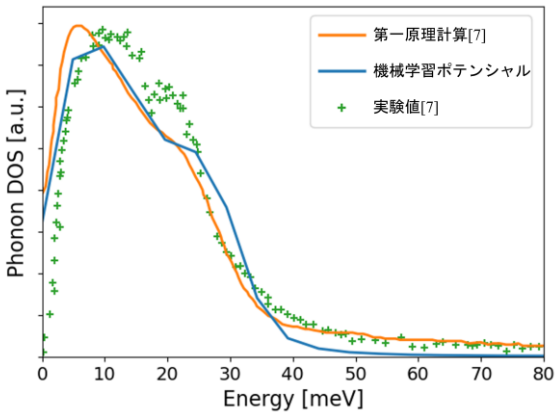

図 1 振動状態密度の比較

© 2022年 応用物理学会