

ニューラルネットワークポテンシャルを用いた薄膜WS₂の原子構造の解析Analysis of atomic structures of layered WS₂ by neural network potential東大工¹, 東工大工² ○(M1)大塚 竜慈¹, 清水 康司¹, 若林 整², 渡邊 聡¹UTokyo¹, Tokyo Tech²,○Ryuji Otsuka¹, Koji Shimizu¹, Hitoshi Wakabayashi², Satoshi Watanabe¹

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

2次元ファンデルワールス材料は物理的・化学的な特性から近年注目を集めており、中でも遷移金属ジカルコゲナイド(TMDC)はその優れた移動度やゼーベック係数から熱電材料や MISFET への応用が期待され、盛んに研究されている[1, 2]。その中でも単層WS₂は比較的高い移動度を持つことが知られており[3]、注目を集めている。しかし、デバイスの性能に大きな影響を与える原子構造の乱れに対する解析は実験からは十分に行えておらず、計算による解明が望まれている。本研究では、大きな系や複雑な系に対して密度汎関数法(DFT)に基づく第一原理計算を行うことは計算コストの点で難しいことに鑑み、これと同程度の精度を持ち、計算コストの小さい高次元ニューラルネットワークポテンシャル(HDNNP)[4]を用いてWS₂の原子構造の乱れの詳細を解明することを目指す。

まず、結晶に数個の欠陥(W および S 空孔、格子間 S)を導入したり真空層を導入したりした多様な構造を用い、それらに対して DFT 計算を行って得た訓練データを用いて予測精度の粗い HDNNP を作成した。DFT 計算においては、交換相関汎関数としてファンデルワールス密度汎関数[5, 6]を用いた。作成した粗い HDNNP を用いた分子動力学(MD)計算により、1~3 層からなる多様な原子配置の乱れたスラブモデルを得た。これらの構造に対して DFT 計算を行って作成した訓練データを用いて作成した HDNNP による予測結果の DFT 計算結果とのエネルギーと原子間力の平均二乗偏差は、訓練データに対して 6.12 meV/atom および 139 meV/Å、テストデータに対して 6.41 meV/atom および 138 meV/Å であった。

この精度の高い HDNNP を用いて MD 計算を行った結果、原子数 300 個前後の S/W 比 1.7~2.0 の構造において、取り除く欠陥量に応じて 6 員環でない環構造を持つ局所構造が出現し、これらは点欠陥構造よりも安定であることが DFT 計算からも確認できた。講演では、これらの構造とその安定性や移動挙動の詳細を報告する。

謝辞：本研究は科研費学術変革領域研究「超秩序構造科学」(21H05552)の支援を得て行われた。

参考文献：[1] G. Kogo, et al., Sci. Rep. 10, 1067 (2020); [2] T. Hamada, et al., Jpn. Appl. Phys. 61 (2022) SC1007; [3] W. Zhang, et al., Nano Res. 7, 1731 (2014); [4] J. Behler, and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 98, 146401 (2007); [5] M. Dion, et al., Phys. Rev. Lett. 92, 246401 (2004); [6] H. Rydberg, et al., Phys. Rev. Lett. 91, 126402 (2003).