

酸素空孔に関する系統的計算と機械学習

(東工大¹) 熊谷 悠¹

High-throughput Computation and Machine Learning on Oxygen Vacancies (¹*Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology*, ○Yu Kumagai¹)

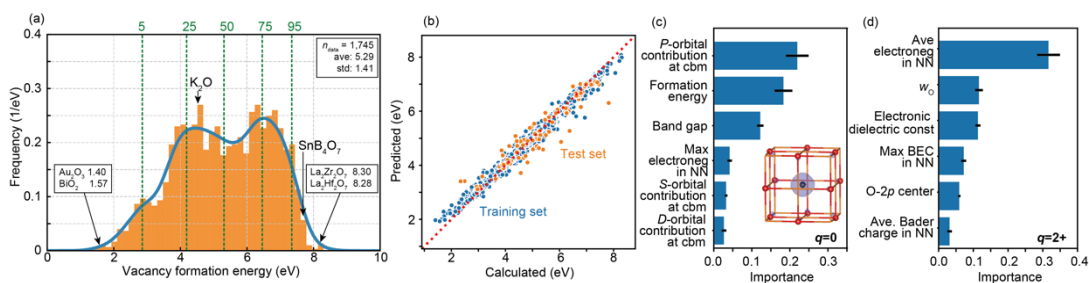
Oxides are used in a variety of applications because they exhibit various mechanical, electrical, and optical properties. Although oxygen vacancies are known to play important roles in these functions, previous researches focused on individual oxides and its general knowledge has not yet been obtained. We therefore performed high-throughput calculations for oxygen vacancies and used the database to regress the point defect formation energies by machine learning.

As shown in Fig. (a), the neutral oxygen vacancy formation energy is found to be distributed in a wide range of 7 eV. We also performed random forest¹⁾ machine learning on the oxygen vacancy formation energies (Fig. (b)), and confirmed that we could predict them with an accuracy of 0.3 eV. Furthermore, the importance for neutral oxygen vacancies (Figs. (c) and (d)) is mainly related to stability and electronic structure of the oxide, whereas that for divalent ones, the quantities related to the electrostatic energy, such as the ionicity and dielectric constant of the oxide, are important factors.

Keywords : Oxygen vacancies, Computational materials DB, Materials informatics, First-principles calculations

酸化物は、機械的、電気的、光学的特性に於いて多様な機能を発現することから、様々な用途に用いられている。それらの機能発現において、酸素空孔が重要な役割を果たすことが知られているが、その研究は個々の酸化物を対象としたものであり、大規模な解析による知見を得るに至っていなかった。そこで本研究では、酸素空孔特性を対象に系統的な計算を行い、それを用いて、点欠陥形成エネルギーの機械学習による回帰を行なった。

図(a)に示すように、中性酸素空孔形成エネルギーは、7eV の広い範囲で分布することがわかった。またそのエネルギーを対象にランダムフォレストを用いた回帰を行なったところ(図(b))、0.3 eV の精度で予測できることを確認した。更に、得られた記述子の重要度を調べたところ(図(c, d))、中性酸素空孔では、酸化物の安定性や電子構造が重要な因子であるのに対し、2価酸素空孔では、酸化物のイオン性や誘電定数など静電エネルギーに関する物理量が重要な因子である事がわかった。



(a) Neutral oxygen vacancy formation energy distribution and (b) comparison of calculated and predicted results by machine learning. (c, d) Importance of neutral and divalent oxygen vacancy formation energies. 1) Random Forests, L. Breiman, *Machine Learning* **2001**, 45, 5.