

ニューラルネットワーク MD による CNT の熱伝導率の予測

Prediction of Thermal Conductivity of CNT by Neural Network MD

伊藤忠テクノソリューションズ¹, 東京理科大² ○森 一樹¹, 加藤 信彦¹, 斎藤 方大¹, 小柳 潤²

CTC.¹, TUS², °Kazuki Mori¹, Nobuhiko Kato¹, Masahiro Saito¹, Jun Koyanagi²

E-mail: kazuki.mori.013@ctc-g.co.jp

【緒言】 カーボンナノチューブ (CNT) はナノテクノロジーの新素材として今後の産業で期待されている。本研究では、CNT の熱伝導率を理論計算で評価する方法について新しい手法の提案を行う。これまで古典分子動力学法が主に用いられてきた。しかし、従来の古典力場では CNT の高い熱伝導率を十分に評価することが困難である。一方で、第一原理計算を用いた高精度計算では小規模なモデルしか取り扱えないため、CNT の多岐にわたる構造を計算しようとする計算コストがかかってしまう。そこで、第一原理計算よりも高速で既存の分子動力学計算よりも高精度なニューラルネットワーク MD (NNMD) を用いて単層カーボンナノチューブ (SWCNT) の格子熱伝導率を評価した。

【計算条件】 カイラリティ(4, 4), (6, 6), (8, 8), (10, 10)とし、第一原理 MD で温度 0K から 700K、圧力 0 から 200kbar の条件下で計算を行い、学習モデル約 250,000 個で NN ポテンシャルを作成した。第一原理計算には VASP、NN ポテンシャルには DeePMD-kit、NNMD には Lammmps+DeePMD を使用した。Exabyte.io の Azure クラウド計算機を 80 ノード使用し 14 時間で NN ポテンシャルを作成した。

【結果】 各計算方法より得られたフォノン分散曲線を示す。従来の古典力場である Tersoff では負の振動数が現れてしまい、第一原理計算の結果から大きくずれた結果となる。一方で、NNMD のフォノン分散の計算結果は、第一原理計算の結果と近いことが分かる。

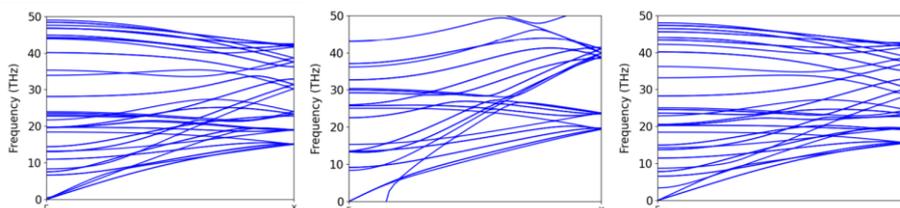


図 1 フォノン分散 (左 : 第一原理、中央 : Tersoff、右 ; NNMD)

各計算方法より得られた格子熱伝導率を示す。従来の古典力場である Tersoff は第一原理計算結果よりも 1 桁小さな値となったが、NNMD の格子熱伝導率は、第一原理計算の結果と近い結果となった。また計算時間は、第一原理計算 : 60 min. に対して、NNMD は 3min. Tersoff は 0.3 min. であった。

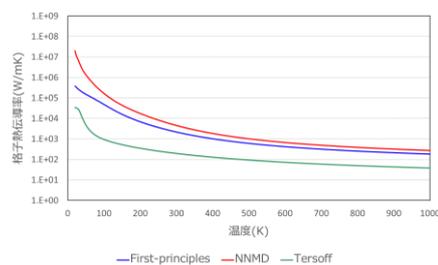


図 2 格子熱伝導率

【謝辞】 本研究の一部は JST 未来社会創造事業 (課題 ID : 19215408) の一環として遂行された。ここに謝意を表す。