

人工ニューラルネットワークに基づく

銀カルコゲナイドの原子間ポテンシャルの構築と熱伝導度計算への応用

熊本大学 下條研究室 竹下 雄輔

未利用エネルギーの活用のために高効率な熱デバイスの普及が重要であり、その材料として Ag_2Se などの銀カルコゲナイド系が注目されている[1]。例えば、熱伝導度が非常に小さいことから熱電材料として期待され、また室温付近での熱伝導度の温度依存性が組成によって大きく変わることから熱整流素子の材料として期待されている。このように銀カルコゲナイド系の熱デバイス材料としての応用範囲は広い。特に熱伝導度はその性能を大きく左右する物理量の1つであるから、その温度依存性や組成依存性についての深い理解は高効率なデバイス開発の鍵となるだろう。

そこで我々は平衡分子動力学 (Equilibrium Molecular Dynamics, EMD) 法と Green-Kubo 公式を用いた格子熱伝導度計算に取り組んでいる。しかし、この方法では EMD 法によるシミュレーション時間を長くとる必要があるので、精度が高い反面計算コストが高い第一原理分子動力学 (First-Principles MD, FPMD) 法によってデータを収集するのは困難である。そこで FPMD 法によるデータを人工ニューラルネットワーク (Artificial Neural Network, ANN) [2]に学習させ、この ANN に基づいた原子間ポテンシャル (ANN ポテンシャル) を用いて EMD 法を行うことにした。この方法であれば低い計算コストで FPMD 法と同程度に高精度な結果を得られる。ただし、ANN ポテンシャルの精度が結果に影響するので、ANN ポテンシャル構築手法の改善も重要な課題となる。

本研究では、銀カルコゲナイドの格子熱伝導度の温度・組成依存性を見積もるための足がかりとして、まず 300 K の Ag_2Se を対象として ANN ポテンシャル構築手法や格子熱伝導度の計算方法の改良を行った。結果的に格子熱伝導度としては $0.306 \pm 0.013 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ という実験値 ($0.4 \sim 0.5 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) に近い値が得られるようになった。論文では計算条件の調整過程などについて詳細に議論している。

[1] K. Hirata *et al.*, *J. Electron. Mater.* **49**, (2020) 2895.

[2] J. Behler *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, (2007) 146401.