

熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御  
2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書
-----------------

南谷英美

東京大学大学院 工学系研究科  
講師

層状物質における電子フォノン相互作用の波数・エネルギー分解第一原理解析

## § 1. 研究成果の概要

2018年度は、グラフェン・ $\text{MoS}_2$ 等の層状物質だけでなく、パワー半導体としての可能性が注目されているGaNに対して、電子フォノン相互作用の解析と、その結果を用いたフォノン散乱律速移動度のシミュレーションに取り組んだ。室温領域での実験結果を再現する計算条件を同定することができ、デバイス性能を決める微視的なファクターの解明や、より良い性能を出すための設計指針に向けた足がかりが得られた。

また、研究を進める中で、フォノンや電子フォノン相互作用の第一原理計算における非常に高い計算コストが、今後の研究展開のボトルネックとなることを痛感した。そこで、計算スピードの劇的な改善を目指し、機械学習の応用を試みた。とくに、汎化性能や応用展開の柔軟性が高いニューラルネットワークに着目した。様々な構造における原子の位置の情報を加工した特徴量と、その構造における原子にかかる力を第一原理計算したデータを教師データとして学習させることで、構造を入力とし力を出力とするニューラルネットワークを作成した。このニューラルネットワークによってSiやGaNにおけるフォノン分散を計算したところ、第一原理計算の結果よく再現でき、力の予測精度が高いことが確認できた。次年度に熱伝導率への応用を目指し、研究を進めている。

## § 2. 研究実施体制

- ① 研究者:南谷 英美 (東京大学大学院工学系研究科 講師)
- ② 研究項目
  - ・第一原理計算を用いた電子フォノン相互作用の解析