

南谷 英美

自然科学研究機構分子科学研究所
准教授

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

2019 年度は、半導体材料中で電子フォノン相互作用によって、電子の持つエネルギーが熱に転換されるレートを計算するためのコード開発を進めた。グラフェンでのテスト計算を終え、計算結果の妥当性が検証されたので、現在、他の半導体材料への展開を進めている。

また、2018 年度より進めている、機械学習を応用した熱伝導率計算について進展が得られた。様々な変位が入った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 および GaN のバルク結晶における熱伝導率をボルツマン方程式に基づいた手法で計算したところ、第一原理計算の結果が数%以内の誤差で再現できた。現在、より高効率な学習データ生成や学習方法、他の材料系への応用可能性を探っている。

