

## 2023年度 独創的研究助成費 実績報告書

2024年 3月23日

報告者	学科名	情報通信工学科	職名	准教授	氏名	野田 祐輔
研究課題	大規模ナノスケールシミュレーションによる低誘電率材料の誘電特性解析					
研究組織	氏名	所属・職		専門分野	役割分担	
	代表 野田 祐輔	岡山県立大学 情報工学部 情報通信工学科・准教授		計算材料科学	研究総括、計算実行	
研究実績の概要	<p>近年、高速・大容量、多接続、低遅延のデータ通信を可能とする次世代移動通信システム（5G・6G）の開発が進められている。次世代通信技術を支える先端半導体では、高周波帯域の信号によるデータ通信が中心となる。これを実現するためには、通信信号の減衰（伝送損失）を抑制しながら高周波の信号に対応できる低誘電率（Low-k）材料が必要不可欠である。現在まで、Low-k 材料に関する研究開発はほとんどが実験によって材料の特性を評価しており、材料開発に費用と時間がかかっている。そのため、理論計算によって Low-k 材料の誘電特性を解析して材料開発に利用する研究が求められている。</p> <p>本研究では、Low-k 材料の一つである SiO<sub>2</sub> (α-quartz) に注目し、大規模シミュレーションへの応用を想定して、計算科学（第一原理計算）の結果を訓練データとする Si-O 二元系の機械学習型原子間ポテンシャル（Machine-Learning Interatomic Potential : MLIP）の開発に取り組んだ。α-quartz 単結晶および酸素点欠陥を含む Si 単結晶の結晶構造を多数生成し、密度汎関数理論（DFT）に基づく第一原理計算ソフト VASP を用いて電子状態計算を実行し、原子座標と全エネルギーに関する訓練データセットを作成した。訓練データセットに含まれるサンプルデータ数は、α-quartz 単結晶は 16,142 件、酸素点欠陥を含む Si 単結晶は 13,869 件、合計で 30,011 件である。全エネルギー予測モデルの手法として、線形回帰ベースの機械学習アルゴリズムである部分的最小二乗法（Partial Least Squares : PLS）を採用した。本研究で実行した計算は全て、名古屋大学スーパーコンピュータ「不老」の計算機で実行した。</p> <p>30,011 件の訓練データを 2 : 8 で訓練用および検証用に分割し、それぞれのサンプルデータに対する Si-O 二元系結晶構造の全エネルギー予測精度を図 1 に示す。図中のグラフに示される青色の小さなプロットはサンプルデータの全エネルギーの数値（横軸：DFT 計算から算出した全エネルギー、縦軸：PLS 機械学習モデルから予測した全エネルギー）であり、青色のプロットの傾向が概ね <math>y = x</math> の関係になっていることから、比較的予測精度の良い結果が得られた。</p>					

※ 次ページに続く

別の検証として、任意の物質について配向分極に由来する複素誘電率を理論的に求めるプログラムの開発に取り組んだ。誘電緩和の代表的な理論モデルである Debye 型緩和モデルに基づいて複素誘電率を求める方法を採用したが、期待する成果が得られなかった。今後の課題として、プログラム内のエラーを発見して対処し、想定する複素誘電率を高精度に予測するプログラムの開発を継続する。

研究実績  
の概要

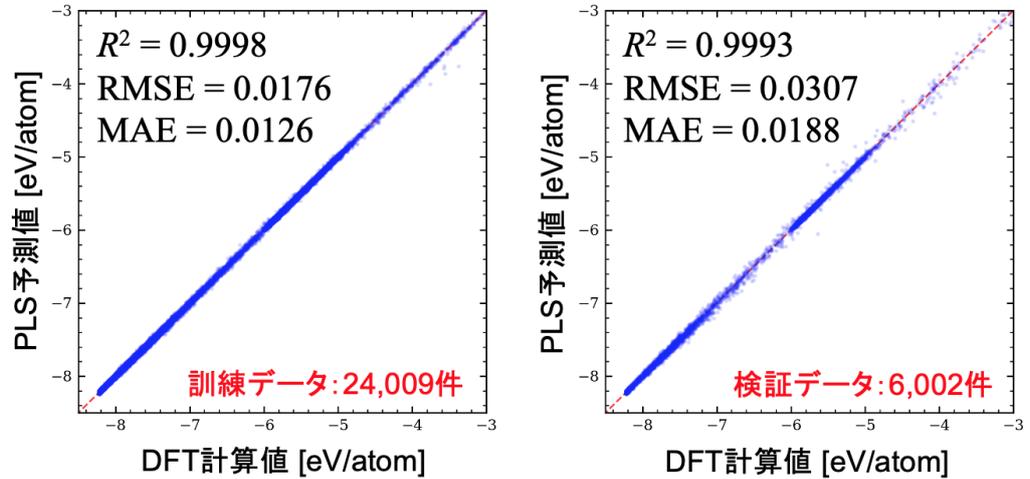


図 1. Si-O 二元系の全エネルギーの予測精度。(a) 訓練データ, (b) 検証データ

(該当なし)

成果資料目録