

機械学習によるAu薄膜上Si単層シートの安定構造の探索

岡山県立大学 情報工学部 濱本雄治

目的 Au薄膜を用いた偏析法で近年合成された平坦なSi単層シートは、Ag表面上の真空蒸着で合成された従来のSi単層シートと本質的に異なる構造を持つ。本研究では前者の構造の詳細を理論的に決定する。

内容 密度汎関数法と機械学習を組み合わせた効率的な構造探索手法を用いて、Au薄膜上のSi単層シートの安定構造の決定を試みた。

結果 得られた安定構造のうち、Au薄膜にわずかにケイ素化しSi単層シートに空孔が含まれる場合、平坦構造と下地のSi表面に対する回転角が実験結果を再現することが分かった。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

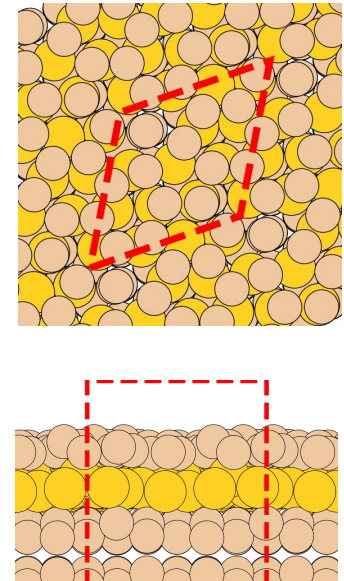


図 得られた安定構造の例