

アモルファス Si における熱伝導率とパーシステントホモロジーの相関

Correlation between thermal conductivity and persistent homology in amorphous Si

分子研¹, 東大工², 理研³, 青山学院大⁴ [○]南谷英美¹, 志賀拓磨², 大林一平³, 柏木誠⁴

IMS¹, UTokyo², RIKEN³, AGU⁴

[○]Emi Minamitani¹, Takuma Shiga², Ippei Obayashi³, Makoto Kashiwagi⁴

E-mail: eminamitani@ims.ac.jp

アモルファス材料の物性として、近年注目されているものが熱伝導率である。アモルファス材料における格子熱伝導率は、結晶より2、3桁低下することが多い。格子熱伝導率の低下は、構造の乱れによるフォノンの散乱が原因であるが、不規則性ゆえに構造特性との関係を直接的に議論することは困難であった。アモルファスの構造については、原子のつながり方の特性を数学的に抽象化したトポロジーの重要性が以前より示唆されてきた[1]。本研究では、各種数値データにおけるトポロジーを抽出する技術の一つ、パーシステントホモロジー群を応用し、アモルファス Si 構造でのトポロジカルな情報と熱伝導率に相関があるかを調べた。

アモルファス Si の構造モデル作成は、LAMMPS を用いた古典分子動力学法による melt-quench シミュレーションで行った。NVT アンサンブルで 300K から 3300K まで昇温させた後、 10^{10} K/s から 10^{14} K/s の冷却レートで急冷した。得られたアモルファス構造モデルを用いて Allen-Feldman 理論に基づいた熱伝導率計算を GULP によって行った結果、冷却レートによって熱伝導率が有意に変化することが確認できた。

次に、冷却レートの違いによって生じる構造の特徴を調べるために、異なった冷却レートで生成された各アモルファス構造に対して、1 次パーシステント図を HomCloud によって計算した。1 次パーシステント図に含まれる情報を Persistent Image[2]によってベクトルに変換した。そのベクトルと熱伝導率計算結果のペアをデータセットとして、Ridge 回帰を行ったところ、1 次パーシステント図の情報を用いて熱伝導率を予測できることが判明した。

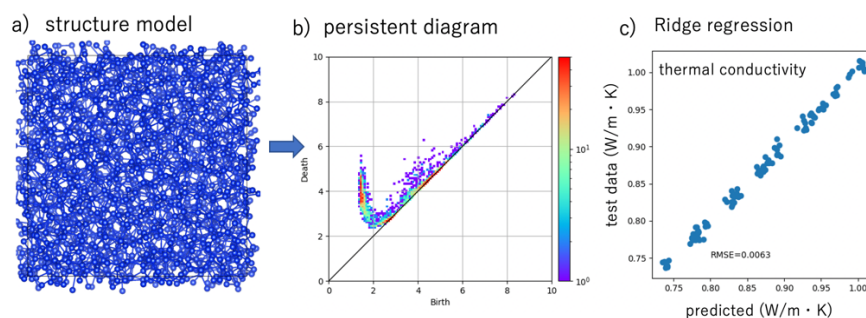


Figure 1 a) Structure model of amorphous Si, b) one-dimensional persistent diagram obtained for structure shown in a), c) Result of thermal conductivity prediction from the model obtained from Ridge regression

[1] Y. Hiraoka *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci, 113 (2016) 7036. [2] I. Obayashi, Y. Hiraoka, M. Kimura, J. Appl. Comput. Topol., 1 (2018) 421-449, H. Adams *et al.*, J. Mach. Learn. Res., 18 (2017) 1.