力学機能のナノエンジニアリング
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

南谷 英美

自然科学研究機構 分子科学研究所
准教授

構造トポロジー情報を応用した靭やかな機械学習力場の構築

§1. 研究成果の概要

パーシステントホモロジー解析を応用した、アモルファス構造における熱伝導率と局所構造の相関解明を進めた。具体的なターゲットとしてはアモルファス Si とアモルファス C に着目した。アモルファス Si については、古典分子動力学法を、アモルファス C については第一原理分子動力学法を用いた構造作成を行った。得られたアモルファス構造に対して、熱伝導率のシミュレーションを行った。アモルファスにおける熱伝導率は、結晶とは異なり、フォノンの緩和では記述できない。そこで久保公式をベースとした理論、Allen-Feldman 理論を用いた。様々な計算手法との組み合わせを可能にするために、Allen-Feldman 理論のシミュレーションコードの開発も行った。

成果として、アモルファス構造作成時の冷却レートや、密度と熱伝導率の関係が明らかになった。また、これら冷却レートや密度と構造の乱れの関係を、パーシステントホモロジー及びその逆解析によって見出した。いずれのパラメーターも Si や C 原子が作るリング構造の形状やサイズに影響を及ぼすことが判明した。さらに、構造の特性と熱伝導率を結びつける回帰モデルを、パーシステントホモロジー解析の結果を用いて作成できることを示した。

これらの成果を 2 本の論文にまとめた。アモルファス C についての論文はアクセプトされ、近日中に出版される予定である [1)]。アモルファス Si についての論文は現在査読中であるが、プレプリントを Arxiv 上で公開している(https://arxiv.org/abs/2107.05865)。

【代表的な原著論文情報】

1) “Relationship between local coordinates and thermal conductivity in amorphous carbon”, J. Vac. Sci. Technol. A, vol. 40, 2022, in press