

固体電解質中のイオンダイナミクスのトポロジカルデータ解析

Topological Data Analysis of Ion Dynamics in Solid Electrolyte

○赤木 和人(東北大 AIMR)

○Kazuto Akagi (AIMR, Tohoku Univ.)

E-mail: kazuto.akagi.b5@tohoku.ac.jp

データを活用した物質デザインにおいて目的のマクロ物性に影響するマイクロ因子の解明は重要な課題であるが、計算機の発達に伴って大規模かつ複雑なシミュレーションが容易になる一方、得られたデータから有用な情報を抽出する作業は困難さを増している。離散点の集合が作る「形」を幾何学的な「穴」の情報で表現するパーシステントホモロジー (PH) を活用したトポロジカルデータ解析 (TDA) ^{1,2} は、そのような作業に対する有用なアプローチを提供する。3次元のデータにはつながり/リング/空洞に対応する0次/1次/2次の穴が含まれ、フィルトレーションと呼ばれる操作に伴う穴の生成と消滅がパーシステント図 (PD) という2次元プロットとして定量的に記録される。PDは3N次元データを2次元データに次元削減した「系の指紋」であり、大規模かつ複雑なデータの時間発展を調べることが容易になる。

本研究では2次電池の固体電解質のモデル系として Li_2O を対象とし、イオン伝導度に影響するマイクロ因子として複数のイオンの協奏的な動きを抽出する試みを報告する。Oイオンが結晶格子を保ちつつ Liイオンのみが拡散する超イオン状態の温度領域で約4,000原子系の古典MD計算を行い、PHの計算には HomCloud (<https://homcloud.dev/>) ³ を用いた。MDトラジェクトリのPDに含まれる協奏的なダイナミクスを実空間で逆解析したところ、図のように複数のイオンが玉突き状に移動する様子を捉えることができた。また、種々の温度でのMDに対するPD上に協奏的な動きをマップして動き方(経路)と温度との関係も調べた。講演ではこれらの詳細を報告する。

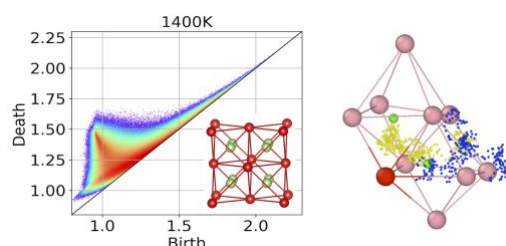


図 高温の Li_2O の MD トラジェクトリに対応する PD (左図) と、協奏的なダイナミクスの成分を抽出して逆解析して得た2個の Li の座標の時間発展 (右図の黄色と青の粒子群)。緑と赤/ピンクの球は $t=0$ での Li と O を表す。

参考文献

- [1] K. Akagi, H. Naito, T. Saikawa, M. Kotani and H. Yoshikawa, *Sci. Rep.* **14**, 12021 (2024).
- [2] 平岡裕章, 大林一平, 赤木和人: 人工知能 **34**, 330 (2019).
- [3] I. Obayashi, T. Nakamura and Y. Hiraoka, *J. Phys. Soc. Jpn.* **91**, 091013 (2022).