

# 計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査

## Survey on innovative analysis methods of materials by data assimilation of simulations and experimental measurements

### 目的 Purpose

- 第一原理計算だけで所定の物性を持つ物質の結晶構造を予測するのは困難
- X線回折実験は位相情報の欠落があるので、結晶構造の決定ができない  
⇒未知、複雑な物質の多数の局所安定構造が存在するなかで、最安定の結晶構造を迅速に予測したい

### 方法 Method

- 気象分野で発展してきたデータ同化手法を物質の構造探査に適用し、第一原理計算による近距離原子間ポテンシャルと、X線回折から得られる長距離周期構造を、同時に考慮して計算  
⇒実験と計算のデータを足し合わせたコスト関数を最小に導き結晶構造特定

### 展望 Prospect

- リアルタイムで実験データと計算データを照らすことが可能なデータ同化プラットフォームを確立し、物質科学の計測装置に組み込む
- データ駆動科学にデータ同化手法を加えることで、未知物質探索プロセスにかかる時間を飛躍的に短縮

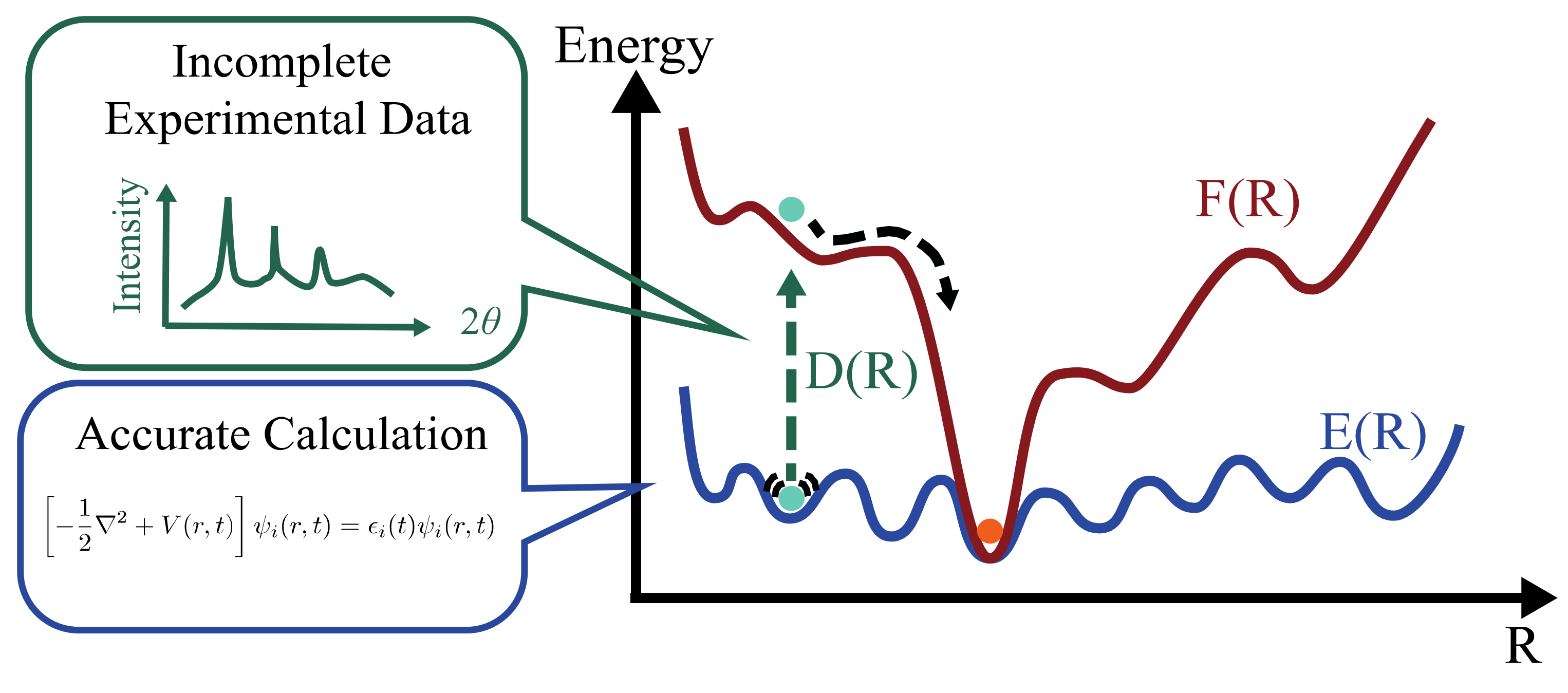
## ハイブリッドコスト関数

Hybrid cost function

ハイブリッドコスト関数  $F(\mathbf{R})$  を最適化

$$F(\mathbf{R}) = E(\mathbf{R}) + \alpha N D[g(\mathbf{R}), g_{\text{obs}}]$$

- $\mathbf{R}$ ; 原子位置
- $E(\mathbf{R})$ ; 第一原理計算により計算されたエネルギー
- $\alpha$ ; 実験データの重み
- $N$ ; 原子数
- $D$ ; X線回折パターンの一致度
- $g(\mathbf{R})$ ; 原子位置から計算されるX線回折パターン
- $g_{\text{obs}}$ ; 実験で観測されたX線回折パターン



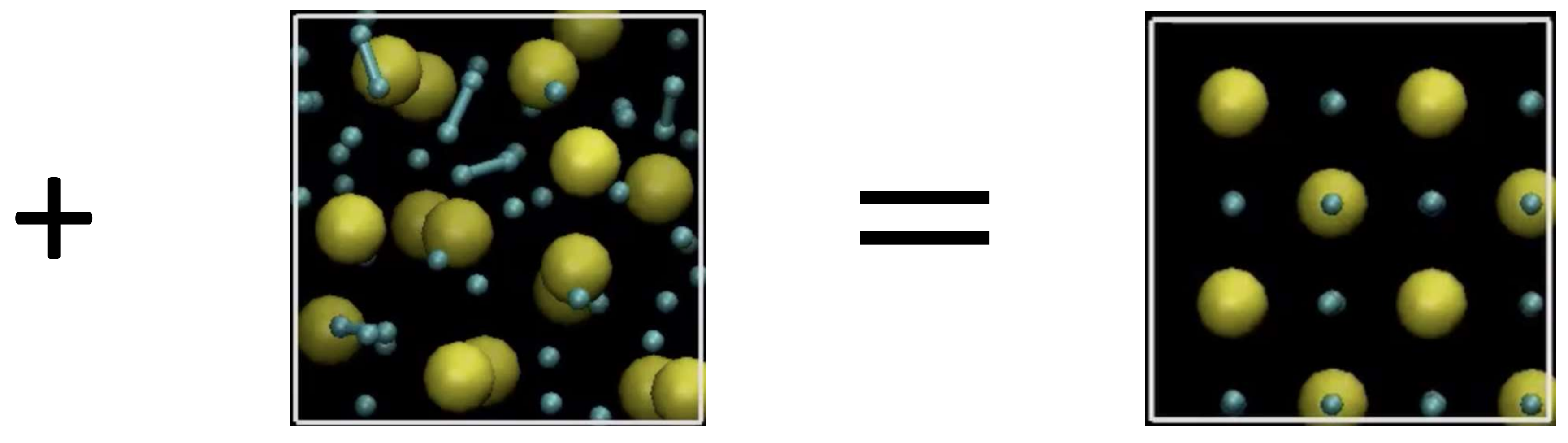
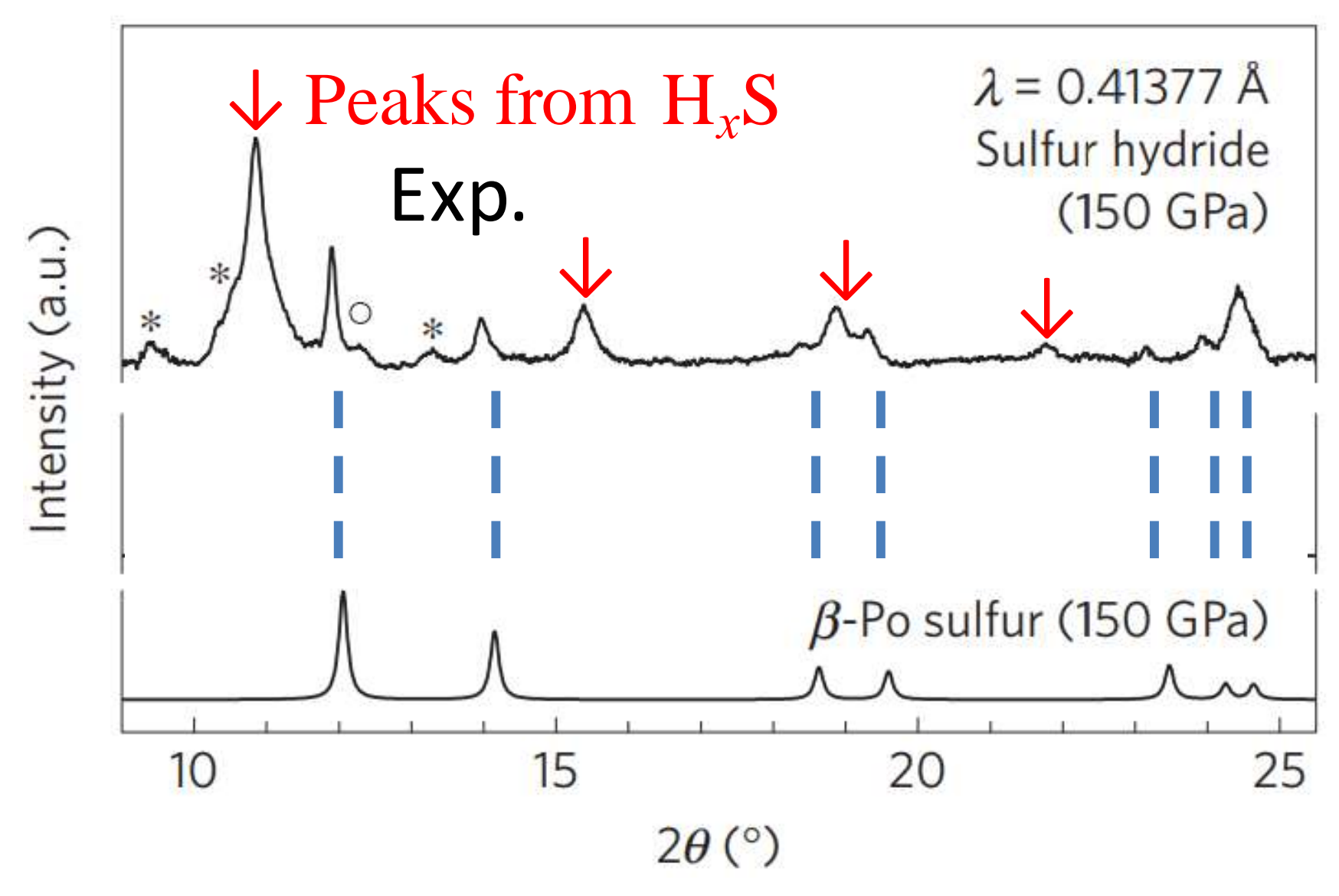
## 高温超伝導体 $\text{H}_3\text{S}$ の結晶構造予測

Crystal structure prediction of high-Tc superconductor  $\text{H}_3\text{S}$

水素はX線回折では見えないため位置は定まらない

第一原理計算だけだと最安定結晶構造が定まらない

データ同化で水素の位置も含め正確な結晶構造を予測可能に



N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo, S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Materials 2, 053801 (2018)