

陽電子回折データ解析プログラムの高度化に向けての調査研究

Investigation for the Sophistication of the Analysis of Positron Diffraction Data

目的 Purpose

物質材料の機能は原子の種類と配列で決まるため、機能解明と構造解明は物性研究の2本柱である。KEK物構研低速陽電子実験施設では、最表面の構造解明に決定的な手法である陽電子回折実験を世界の先頭を切っている。本調査研究では、解析にもちいるソフトウェアを高速・自動化して解析時間と信頼性を格段に向上させると共に、ユーザーへの波及の方策を探った。

方法 Method

本調査研究が“かけはし”となって、実験装置の開発者、ユーザー、統計物理・計算物理の専門家、データ駆動科学の専門家が集うユニークな研究体制を構築している。各参画機関が協力して、量子ビームによる回折データ解析のためのプログラムモジュールを探索し、試作した。

展望 Prospect

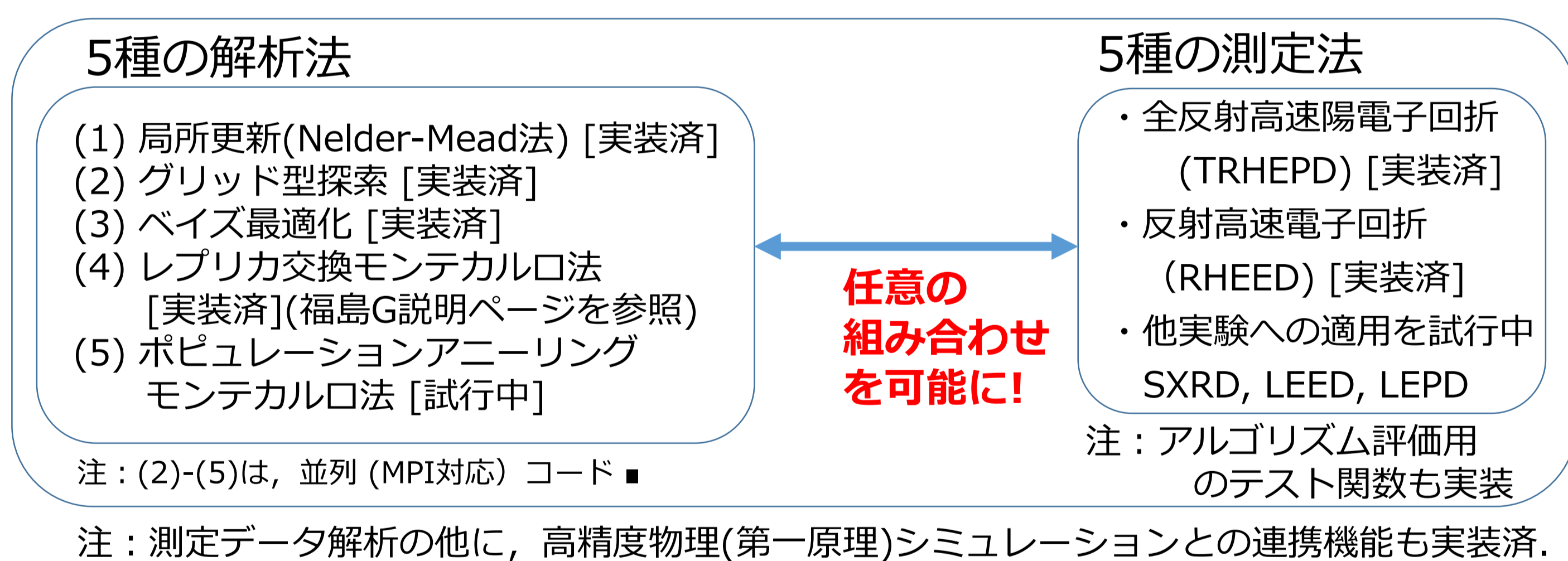
陽電子回折は、物質表面の数層に絞って原子配列を高精度に決定できる実験手法である。その解析法が高度化されれば、触媒、パワーデバイス、スピントロニクスなど、最表面の特性を利用する機能性材料の原子配列の解明を高速・高精度に行うことが可能となる。

成果

Achievements

TIA中核機関以外の連携機関の星准教授（鳥取大）らを中心に、表面構造解析のための汎用データ解析ソフトウェア「2DMAT」が開発された（<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/>）。これにより、従来、熟練した専門家の経験に依存していた構造解析を、一般のユーザーが簡単に短時間で行えるようになりつつある。

図1. 2DMATの概要



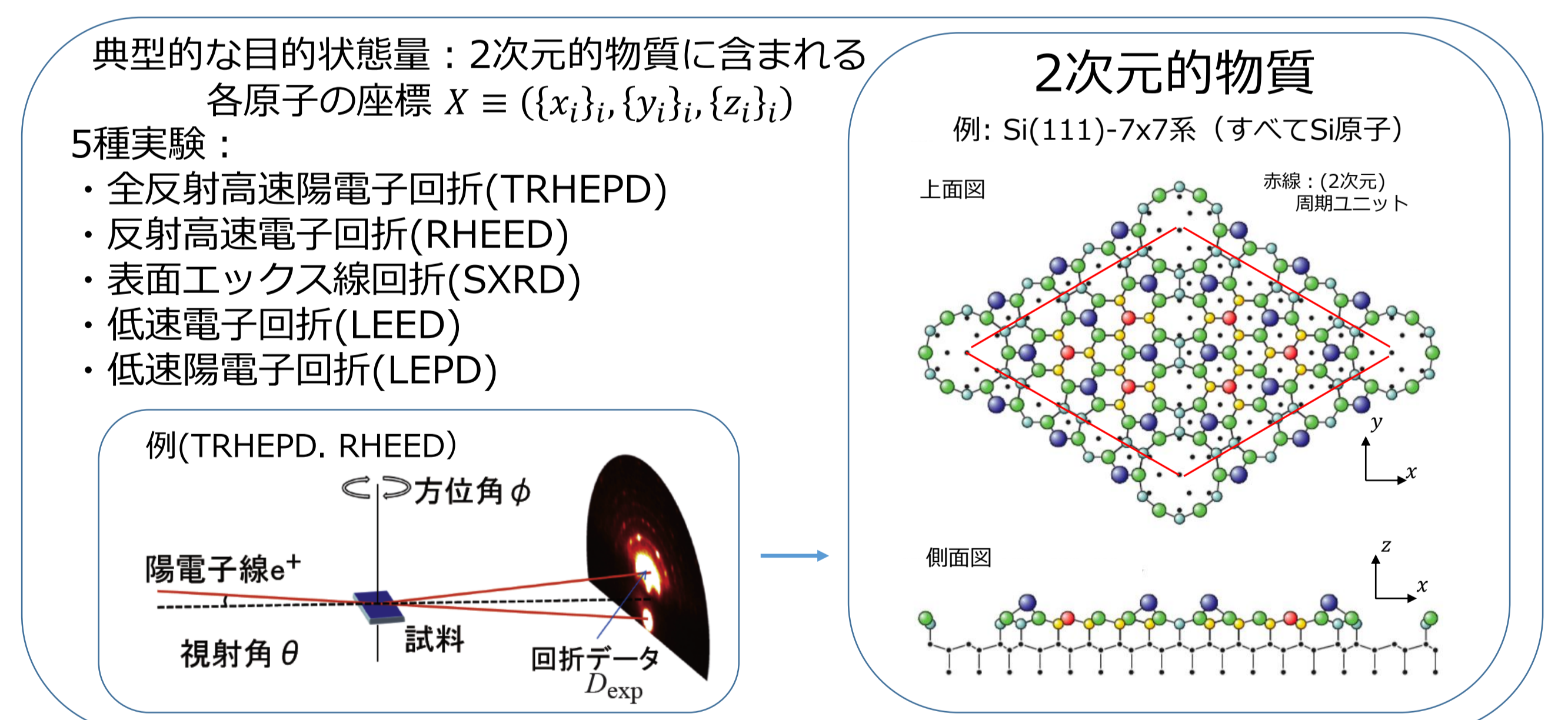
2DMATは、スパコンをもちいて、様々な量子ビーム回折手法で得られた測定データを高速・高精度に解析できるよう設計された汎用構造解析ソフトウェアである。現在、計算アルゴリズムとして、図1に示した5種類の解析法(Nelder-Mead法、グリッド探索、ベイズ最適化、交換モンテカルロ法、PAモンテカルロ法)が実装されている。

今後の展望

Future Plans

高性能触媒材料、省エネ・パワーデバイス材料、スピントロニクス関連材料など、最表面の特性を利用した素材開発は今後ますます重要になってくる。本調査研究の成果を活かし、参画機関研究者と連携して、科研費基盤A、JST-CREST、JST未来社会創造事業などの大型外部資金の獲得を目指す。また、本調査研究を継続して2DMATを広くユーザーに提供し、実地で利用してフィードバックすることで、本ソフトの利便性・汎用性の向上と共に、多様な実験手法によるデータ解析への適用の可能性を探る。

図2. 量子ビーム実験による2次元物質の構造解析



従来解析では、熟練研究者がさまざまな2次元物質の初期配置を設定し、経験を生かしてその原子位置を探っていた。2DMATでは、この試行錯誤プロセスをアルゴリズムを用いて自動化・高速化し、さまざまな困難(モデル構築に熟練が必要、初期配置に依るローカルミニマムが最適解とは限らない、計算時間が膨大)を克服する方策を探り、ユーザーが未知の2次元物質の構造を簡単に決定できるようになることを目指している。