

# 陽電子回折データ解析の高度化 に向けての調査研究 II

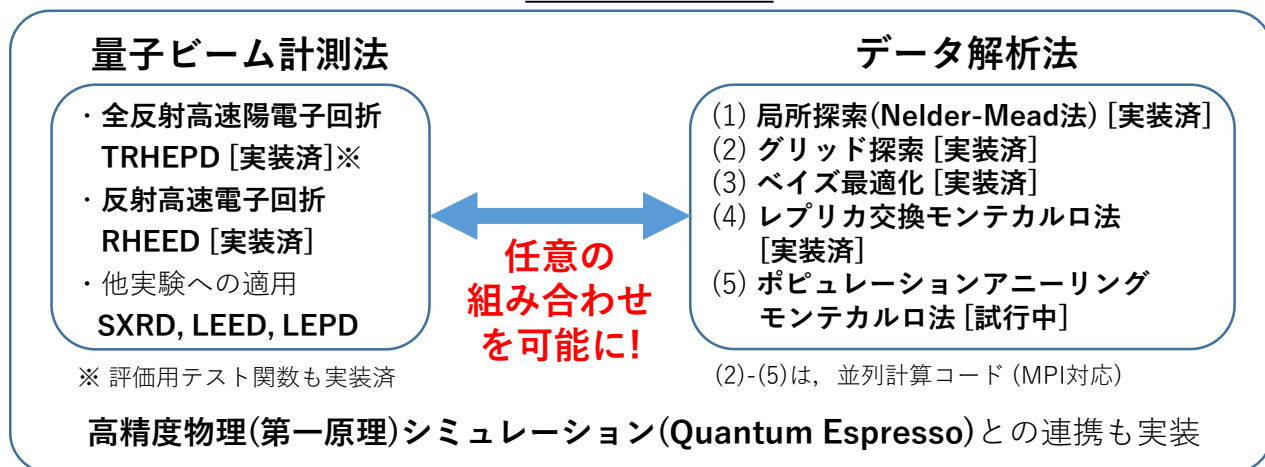
## Investigation for the Sophistication of the Analysis of the Positron Diffraction Data II

### 概要

KEK物構研低速陽電子実験施設（SPF）では、世界の先頭を切って全反射高速陽電子回折（TRHEPD, トレプト）実験を行っている。ここでは、昨年開発された表面構造解析ソフト「2DMAT（<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/>）」をもちいて、従来の解析における種々の困難（計算結果が初期配置に依存するため絶対的な最適配置とは限らないこと、計算時間がかかる等の理由で、解析に熟練が必要なことなど）を解決する。

また、2DMATは陽電子回折実験だけに限らない汎用的な構造解析ソフトとして設計されており、X線や電子線など、他の量子ビーム回折手法への適用を推進する。

### 2DMATの概要



### 実施計画

上記の達成のため、本調査研究において、計算統計・データ駆動科学的手法の活用、DFT計算との連携など、ソフトウェア機能を飛躍的に強化する。このため、SPFにおいて予備的な陽電子回折実験を行い、実地調査と利用者からのフィードバックにより、利便性・汎用性・信頼性・解析時間の向上を目指す。また、ここで開発したソフトウェア機能は共有化してユーザーに広く提供する。さらに、マニュアル整備や講習会・シンポジウム（共にリモート開催）を通して、新規ユーザー開拓や共同研究体制の強化を進め、本課題の延長上にあるデータ駆動科学や物質研究のテーマにて外部資金獲得を目指す。