

# **2020 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」** **調査研究報告書(公開版)**

【研究題目】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

【整理番号】TK20-032

【代表機関】KEK

【調査研究代表者(氏名)】望月出海

【TIA 内連携機関：連携機関代表者】産総研：白澤徹郎，東京大：福島孝治

【TIA 外連携機関】鳥取大学，早稲田大学

【報告書作成者】望月出海 【報告書作成年月日】2021 年 3 月 30 日

【連携推進(具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等)】

高エネルギー加速器研究機構(KEK)，産業技術総合研究所(産総研)，東京大学，さらに鳥取大学，早稲田大学との連携により，連携機関の星准教授(鳥取大)らを中心に，スーパーコンピュータ利用を前提とした，表面構造解析のための汎用的なデータ解析ソフトウェア「2DMAT」を開発した(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/>)。このソフトは，スパコンを用いて様々な実験手法で得られた測定データを高速・高精度に解析できる汎用性を有し，これを利用した全反射高速陽電子回折(TRHEPD，トレプト)構造解析ユーザーの拡大と，他の様々な実験手法によるデータ解析への本ソフト適用を目指した連携研究を進めるための強力なツールとなっている。

また，本調査研究の成果報告会として，2021 年 2 月 9 日に「低速陽電子実験施設研究会」をオンライン開催した(<https://www2.kek.jp/imss/event/2021/02/09spf/>)。本活動により，参画機関の研究者間で連携が深まり，課題メンバーを中心に，大型の外部資金(JST 未来社会創造事業やCREST)申請を行うに至った。残念ながら採択までには至らなかったが，今後もこのメンバーを中心に研究連携を進め，大型外部資金の獲得を目指す。

【調査研究内容(実験等中心に背景・課題と実行された課題解決の内容と結果)】

KEK 物質構造科学研究所の低速陽電子実験施設(SPF)では，世界の先頭を切って陽電子回折法による表面構造解析を行っている。SPF の加速器を利用した高輝度低速陽電子ビームによる TRHEPD 法は，結晶最表面および表面下数原子層の各原子の位置座標を超高感度に決定できる。一方で，このような構造解析は，多数の表面原子の位置座標をパラメータとした高次元探索となるた

め、精度良く原子配置を決定するには計算時間を要する。このため効率的に解析を進めるには、初期モデルの正しい選択や、適切な試行錯誤を行うことが重要で、熟練者の経験が必要となる。

上記問題を打破するため、本連携研究では、近年発展している統計科学の技術を活用しつつ、計測に関するハードウェア&ソフトウェアの相互協力と、解析ソフトの高速化・自動化・共有化・汎用化の方策を調査し、構造解析における計算時間と信頼性を格段に向上させようと試みた。

結果、連携機関（鳥取大）の星准教授らを中心に、スパコン利用を前提とした汎用データ解析ソフトウェア「2DMAT」が開発された。このソフトは、熟練者の経験に基づいた試行錯誤的なモデル探索の代わりに、最適な原子配列探索を、誰でも、経験に頼らず、自動でできるようになることを目指している。そのための計算アルゴリズムとして、大域検索のための自明並列探索（グリッド探索）、交換モンテカルロ法、ベイズ最適化、局所検索のためのNelder-Mead法などが実装された。また、スパコンを利用することで計算時間の問題についてもクリアできる。

本連携研究により、従来、熟練した専門家が試行錯誤していた構造解析を、一般のユーザーが簡単に短時間に行えるようになりつつある。

#### 論文 (2 報)

- (1) K. Wada, M. Maekawa, I. Mochizuki, T. Shidara, A. Kawasuso, M. Kimura, T. Hyodo, "A pulse stretcher for a LINAC-based pulsed slow-positron beam providing a quasi-continuous beam with an energy of 5.2 keV", submitted to Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A. **975** (2020) 164161.
- (2) K. Tanaka, T. Hoshi, I. Mochizuki, T. Hanada, A. Ichimiya, and T. Hyodo, "Development of Data-Analysis Software for Total-Reflection High-Energy Positron Diffraction (TRHEPD)", Acta Physica Polonica A **137** (2020) 188.

#### 学会発表 (11 件)

- (1) 阪田大志郎, 星健夫, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 福島孝治, 「全反射高速陽電子回折(TRHEPD)におけるデータ駆動科学と Si4O5N3/6H-SiC(0001)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ ) R30° 多層表面」, 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会 (2020.12.9, online)
- (2) 和田健, 望月出海, 兵頭俊夫, 永井康介, 保住弥紹, 井上均, 高富俊和, 岩瀬広, 峠暢一 「KEK 物構研 低速陽電子実験施設におけるビーム生成ユニットの更新」, 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会 (2020.12.9, online)
- (3) 和田健, 望月出海, 兵頭俊夫, 永井康介, 「KEK 低速陽電子実験施設報告」, 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会 (2020.12.9, online)
- (4) 永井康介, 和田健, 望月出海, 兵頭俊夫, 「低速陽電子実験施設の近況」, 低速陽電子実験施設研究会 (2021.2.9, online)
- (5) 望月出海, 和田健, Rezwan Ahmed, 兵頭俊夫, 永井康介, 「汎用試料準備チャンバーの整備」, 低速陽電子実験施設研究会 (2021.2.9, online)
- (6) 和田健, 白澤徹郎, 望月出海, Rezwan Ahmed, 前川雅樹, 河裾厚男, 兵頭俊夫, 「3層遅延線アノード検出器を用いた低速電子回折図形の観測と低速陽電子回折実験への応用」, 低速陽電子実験施設研究会 (2021.2.9, online)

- (7) Rezwan Ahmed, “Structure determination of Pd(111)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30° -Pb using LEED and future LEPD experiment at KEK”, 低速陽電子実験施設研究会 (2021.2.9, online)
- (8) 永井康介, 和田健, 望月出海, Rezwan Ahmed, 長嶋泰之, 兵頭俊夫, 一宮彪彦, 五十嵐教之, 二谷浩明, 小菅隆, 齋藤裕樹, 石井晴乃, 永谷康子, 古川和朗, 峠暢一, 諏訪田剛, 榎本嘉範, 白川明広, 設楽哲夫, 岩瀬広, 河裾厚男, 前川雅樹, 白澤徹郎, 満汐孝治, 石田明, 周健治, 星健夫, 「低速陽電子実験施設報告」, P2-233W, 量子ビームサイエンスフェスタ 2020 (2021.3.9~11, online)
- (9) 濱田雅史, 辻川夕貴, 武田智也, 阪田大志郎, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり, 「Pb/Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  表面超構造における構造の原子密度依存性: 全反射高速陽電子回折法とデータ駆動科学による構造解析」, PSJ-14, 日本物理学会第 76 回年次大会 (2021.3.12~15, online)
- (10) 高山あかり, 「陽電子と光子を用いた量子ビーム協奏利用による原子層物質の構造・電子状態の解明」, 16a-Z03-5, 2021 年 第 68 回 応用物理学会春季学術講演会シンポジウム「協奏的量子ビーム利用による実用材料研究のススメ-新しいビームはいかがですか-」(2021.3.16-19, online)
- (11) 星健夫, 阪田大志郎, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 福島孝治, 「全反射高速陽電子回折(TRHEPD)における計測インフォマティクスと高速計算技術の融合」, 19a-Z32-6, 2021 年 第 68 回 応用物理学会春季学術講演会 (2021.3.16-19, online)

新聞掲載 (1 件 7 報)

共同通信社配信記事「日本の知, どこへ」

20200407 中部経済新聞  
 20200408 山形新聞  
 20200410 東奥日報  
 20200412 福井新聞  
 20200512 茨城新聞  
 20200624 京都新聞夕刊  
 20200701 高知新聞

**【今後の活動予定】**

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。そのような新奇な材料の表面構造解析をテーマとして, 本課題の成果を活かした申請を参画機関研究者と連携して行い, 科研費基盤 A, JST-CREST, JST 未来社会創造事業などの大型の競争的資金の獲得を目指す。また, 今後も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してもらうことで, 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。

以上