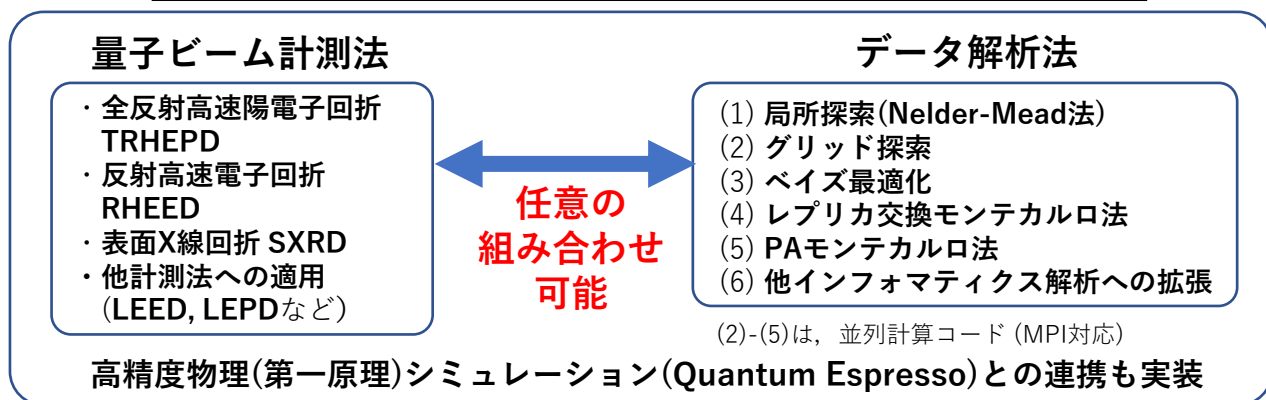


汎用表面構造解析プログラム「2DMAT」 高度化に向けての調査研究

Investigation for the advancement of the general-purpose surface-structural-analysis program, 2DMAT.

概要: KEK物構研低速陽電子実験施設 (SPF) では、SDGs達成のための産業と技術革新の基盤となる機能性表面材料の物性解明に資する、陽電子回折実験を世界の先頭を切っている。本調査研究は、最近開発された汎用表面構造解析フレームワーク「2DMAT」(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/>) の機能を高度化し、従来解析における種々の困難を解決する方策を探る。また、他の量子ビーム計測手法への2DMAT適用を推進する。

汎用表面構造解析フレームワーク「2DMAT」の機能の概略



実施計画: 本調査では、計測インフォマティクス活用、数理・統計手法に基づいた信頼性向上、DFT計算とのシームレスな連携など、2DMATの機能・利便性・信頼性を格段に向上させるための方策を探る。また、ワークショップやシンポジウムを開催し、2DMAT普及のための意見交換をする。そこでは本フレームワークを利用者に実地で使用してもらい、汎用性・利便性等のフィードバックを得る。こうした活動を通じて、新たな計測手法への展開や新規ユーザー獲得、共同研究体制の拡充を目指す。

展望・期待される効果: 例えば陽電子回折法は、物質表面の数層に絞って原子配列を高精度に決定することができ、最表面の特性を利用した機能性材料の原子配列の解明を、2DMATと連携してより高信頼かつスピーディーに進めることが可能となる。また、ここで開発するソフトウェア機能は、基本的にオープンソース化してユーザーに広く提供する。

今後の連携・発展: 産業と技術革新の基盤となる、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、最表面の新奇な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。本調査における予備実験、プログラム開発、マニュアル整備、講習会・シンポジウム (共にリモート開催) を通じて、ユーザー開拓や共同研究体制強化を進め、本課題の延長上にあるハイインパクトな研究展開によって、大型外部資金獲得を目指す。例えば、既に本参画メンバーを中心にCREST研究領域「社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出」へ課題申請している。科研費基盤S、未来社会創造事業などへの応募も積極的に検討する。