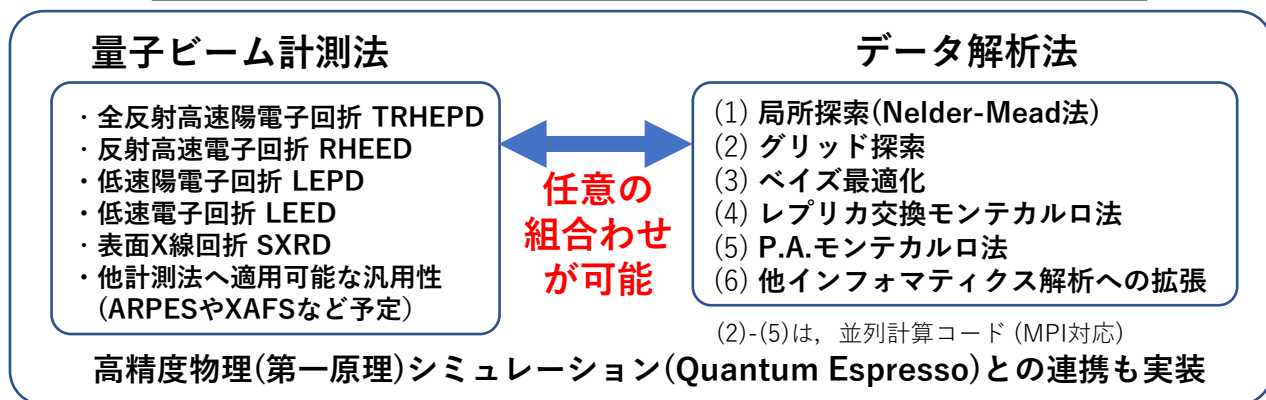


# 汎用表面構造解析プログラム「2DMAT」 高度化に向けての調査研究II

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

**概要:** SDGsに資する産業技術革新の基盤となる、機能性表面材料や二次元物質材料の物性解明を迅速に進めることを目的に、汎用計測データ解析フレームワーク「2DMAT」(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat>)が開発された。本調査研究は、スパコンやデータ駆動科学を駆使した新機能により2DMAT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。

### 汎用計測データ解析フレームワーク「2DMAT」機能の概略



**年間活動計画:** 本調査にてスパコン「富岳」などを利用した超並列計算、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方策を探る。ここでは高度化した機能を連携メンバーや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と共に、講習会やシンポジウムを催して情報展開&収集する。こうした活動により、新たな計測法への展開、新規ユーザー獲得、共同研究体制の拡充を目指す。

**展望:** 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法を例に挙げると、この手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る。ここに2DMATを適用し、二次元物質材料の構造解明をよりスピーディーに達成できれば、SDGsに資する次世代触媒材料・電子デバイス材料開発が加速する。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いるので、迅速にユーザーに展開できる。

**今後の連携・発展:** 産業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る。本調査における実験、プログラム開発、マニュアル整備、講習会等を通じて、新規ユーザー開拓や共同研究体制を強化し、その延長上にあるハイインパクトな研究展開で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」への課題申請の準備を進めている。さらに大型科研費や、創発的研究支援事業などへの応募も積極的に検討する。

KEK物構研 低速陽電子  
実験施設 望月出海  
mochizu@post.kek.jp

