

# 機械学習を用いた ELNES/XANES スペクトル解析手法の開発

## Development of data-driven analytical methods for ELNES/XANES

東大生研<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>, <sup>○</sup>清原 慎<sup>1</sup>, 椿 真史<sup>2</sup>, 溝口 照康<sup>1</sup>

IIS, Univ. Tokyo<sup>1</sup>, AIST<sup>2</sup>, <sup>○</sup>Shin Kiyohara<sup>1</sup>, Masashi Tsubaki<sup>2</sup>, Teruyasu Mizoguchi<sup>1</sup>

E-mail: [sin@iis.u-tokyo.ac.jp](mailto:sin@iis.u-tokyo.ac.jp)

### [研究背景]

物質の原子構造や化学結合は物性に大きな影響を与えるため、材料の局所的な原子・電子構造を計測することは材料研究において重要である。様々な測定手法の中でも、EELS や XAS で取得されるスペクトルの一部である吸収端近傍微細構造(ELNES/XANES)は、局所的な非占有軌道の形状を反映しており、理論計算を併用することで原子構造や化学結合状態を解析することが可能である。一方、理論計算を用いても ELNES/XANES スペクトルから測定領域の物性を定量化することは容易ではない。これまでいくつかの物性の定量化に関する報告がなされているが<sup>1-3</sup>、価数などの限られた物性での報告に限られている。様々な物性をスペクトルから直接定量化できれば、分光法とイメージング法を組み合わせることで実空間における「物性分布」を知ることができ、より直観的な材料開発ができると期待される。そこで本研究ではニューラルネットワークを用いることで、スペクトルから局所的な物性/物理量を直接定量化することを試みた。

### [研究手法]

本研究では機械学習手法としてニューラルネットワークを用いた。ELNES/XANES スペクトルを入力情報として使用し、出力は幾何的な物理量として、励起原子周辺の平均結合距離、平均結合角度、Voronoi 体積を考慮し、化学結合に関する物理量として、Bond overlap population, Mulliken 電荷、励起エネルギーを対象とした。SiO<sub>2</sub>の多形を対象とし、Materials Project というデータベースより 188 種類の結晶構造を選択し、各酸素サイトの O-K 端を訓練及びテストデータとして使用した。

### [結果と考察]

訓練データとテストデータの予測結果を Figure 1 に示す。Fig.1 中の対角線は予測値と真の値が等しい領域を表している。テストデータ(黒丸)が対角線近傍にあることから予測が精度よく行われていることがわかる。幾何的な情報については、平均結合距離 (Fig.1(a))と結合角度 (Fig.1(b))の局所的な情報だけではなく Voronoi 体積 (Fig.1(c))という中距離的な情報も予測できている。また化学結合に関する情報に関しても、幾何的情報と同様に、精度よく予測することができた。さらに実験においては、励起エネルギーは、スペクトルの立ち上がりのエネルギーとして観測されるが、本結果からスペクトル形状自身が励起エネルギーの情報を含んでいることがわかった。また本手法を実験で得られたスペクトルにも適用し、予測精度を確認した。そのほかにも、理論計算では非常に計算コストのかかる

ELNES/XANES 予測を機械学習で置き換えることにも成功した。詳細は当日発表する。

[1] M. Varela et al., Phys. Rev. B, **79**, (2009).

[2] M.N. Grisolia et al, Nat. Phys. **12**, 25 (2016).

[3] T. Mizoguchi et al., Phys. Rev. B, **74**, 235408 (2006).

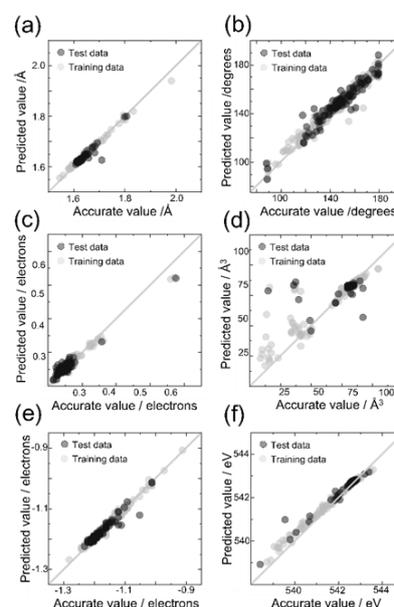


Figure 1. 各物性の予測結果. (a)平均結合距離(b)平均結合角度(c)Voronoi 体積 (d)Bond overlap population (e)Mulliken 電荷 (f) 励起エネルギー