

## 全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) の大域探索型データ解析

### Global searching data analysis for total-reflection high-energy positron diffraction

鳥取大<sup>1</sup>, KEK 物構研<sup>2</sup> °田中和幸<sup>1</sup>, 星健夫<sup>1</sup>, 望月出海<sup>2</sup>, 一宮彪彦<sup>2</sup>, 兵頭俊夫<sup>2</sup>

Tottori Univ.<sup>1</sup>, KEK-IMSS<sup>2</sup>, °K. Tanaka<sup>1</sup>, T. Hoshi<sup>1</sup>, I. Mochizuki<sup>2</sup>, A. Ichimiya<sup>2</sup>, T. Hyodo<sup>2</sup>

E-mail: M18J3027Y@edu.tottori-u.ac.jp

スーパーコンピュータを用いて、全反射高速陽電子回折 (TRHEPD= Total-Reflection High-Energy Positron Diffraction, トレプト, 図 1(a)に概念図) の大域探索型データ解析に取り組んでいる。TRHEPD は RHEED の陽電子版に相当し、表面構造解析の決定打になり得るとして近年注目されている[1]。TRHEPD は日本発の測定手法であり、現状では世界で唯一 KEK 物構研にて実用的測定装置が稼働している。海外での建設も進んでいる。データ解析の高速化・大域探索(モデルフリー・初期値不要)化により、測定装置の潜在能力をさらに開花させることができる。データ解析は従来、熟練研究者の知見と人的作業で行われてきたが、高速自動処理に置き換えていく。具体的には、理論・実験の回折データ残差(R-factor)を評価関数とした大域探索型逆問題解析(回折データ→表面原子座標)を行う。各試行座標に対する順問題計算(原子座標→回折データ)は量子散乱問題[2]を解く。2 自由度解析プログラム[3]を発展させ、多自由度探索が可能となった。既知のルチル型 TiO<sub>2</sub>(110)-(1x1)構造[4](図 1(b)に側面図)を例として、予備的結果を報告する。「one-beam」型解析(z 座標のみの決定)を行なった (ここでの z 軸は、表面と垂直な方向をさす)。表面付近の 3 つの O サイト (図 1(b)の A, B, C), および、2 つ Ti サイト(同 D, E)の 5 原子に対する z 座標を変数として、N=5 次元データ空間における R-factor 値  $R = R(z_A, z_B, z_C, z_D, z_E)$  の大域探索を行った。(i) 大域探索(多重分解能型のグリッド探索), (ii) 局所探索(グリッド上ミニマム点付近における局所最適化, Nelder-Mead 法)の 2 段階探索手法を構築した。結果詳細は当日報告する。さらに、大域データの次元削減(主成分分析)を用いて、重い原子は捉えやすいなどの特徴が、データ科学として定量的に表現された。人的作業から高速自動処理への転換として、着実な進展と言える。数理手法は汎用であり、陽電子回折以外にも適用できる。手法展望として、超並列型モンテカルロ法(ベイイズ推定)と融合し、さらなる高次元探索を行なっていく。

[1] 総説: Fukaya, *et al.*, J. Phys. D 52, 013002 (2019); 兵頭, 固体物理 2018 年 11 月号 p.141; 本会シンポ「陽電子回折による表面科学の新展開と高速化データ駆動科学」. [2] Ichimiya, JJAP 22, 176 (1983). [3] 田中他, 日本物理学会, 2018 年 9 月. [4] Mochizuki, *et al.*, PCCP 18, 7085 (2016) の引用文献。

図 1 (左) (a) 実験概念図. (b) ルチル型 TiO<sub>2</sub>(110)-(1x1) 構造の側面図. 赤玉が Ti 原子, 青玉が O 原子を表す。

