

機械学習を用いた内殻電子励起スペクトルからの物性予測

Quantitative prediction of material properties from core-loss spectrum based on machine learning

東大生研¹, 産総研², [○]清原 慎¹, 椿 真史², 溝口 照康¹

IIS Tokyo Univ.¹, AIST², [○]Shin Kiyohara¹, Masashi Tsubaki², Teruyasu Mizoguchi¹

E-mail: 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、内殻電子励起分光法(Core-loss spectroscopy)は高い空間・エネルギー分解能を有しており、理論計算を併用することで局所的な原子構造や化学結合状態を解析できる強力な手法である。一方で、理論計算を用いても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¹⁻³, 限られた物性でしか成功していない。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。core-loss スペクトルを入力情報として使用し、出力は幾何的な物性情報として、励起原子まわりの平均結合距離、平均結合角度、Voronoi 体積を考慮し、化学結合に関する物性情報として、bond overlap population, Mulliken 電荷を対象とした。工業的に広く利用され、さらにデータベース作成にも適した SiO₂ の多形を対象とし、Materials Project から 188 種類の結晶構造を参照し各酸素サイトの O-K 端を計算し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。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))だけでなく Voronoi 体積 (Fig.1(c))も予測できている。一般に core-loss スペクトルは非常に局所的な原子配置の情報を反映していると考えられているが、この結果から近距離に加えて中距離の情報も十分に含んでいることがわかった。また化学結合に関する情報は Bond overlap population (Fig.1(d))と Mulliken 電荷 (Fig.1(e))を考慮したが、これら2つの物性に関しても比較的精度よく予測できている。これら2つの物性は主に価電子帯の電子構造に起因しており、伝導帯の情報を反映する core-loss には一見無関係のように思われるが、価電子帯と伝導帯は独立ではないために、本手法によりその相関性を正確に予測できたと考えられる。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).

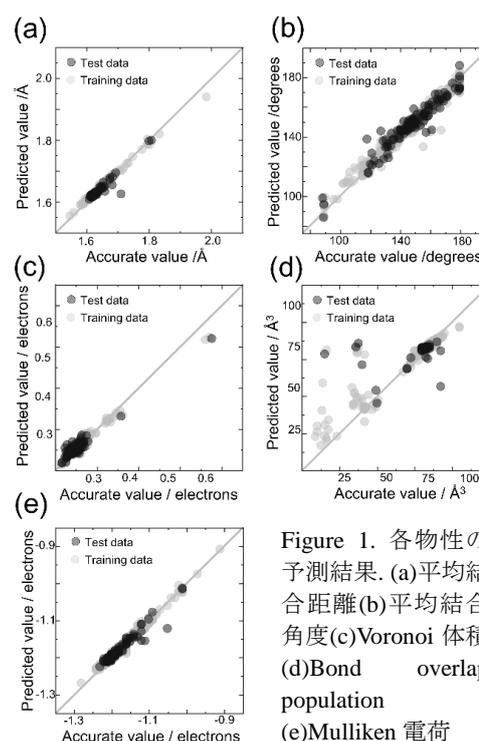


Figure 1. 各物性の予測結果. (a)平均結合距離 (b)平均結合角度 (c)Voronoi 体積 (d)Bond overlap population (e)Mulliken 電荷