

擬自由エネルギーを用いた多様な安定相の探索: 微細組織構造の情報解析

Exploring diverse stable phases by pseudo-free-energy: Information analysis of domain structure

東理大¹ ○小嗣真人¹

Tokyo Univ. of Science¹

E-mail: kotsugi@rs.tus.ac.jp

ミクロ組織はマクロ機能特徴づける重要な情報源である。これまで磁区構造や結晶成長また金属組織など、様々な系の微細組織解析がなされ、幅広い科学技術領域に寄与してきた。

その一方で、我々研究者は取得したデータを十分に解析してきただろうか？ 多くの場合は、組織構造のごく一部をピンポイント解析した後に系全体の物性機能を議論する、やや問題のあるアプローチが長らくとられてきた。つまり情報の大部分が捨てられており、十分な情報抽出が未だ成されていないと言える。その原因として、計測データは大規模な高次元データであり、人的な解析に限界がある。またマクロ機能との対応付けが極めて定性的なのも大きな課題である。

そこで我々は、現代的な情報科学を積極的に活用することで、ミクロな組織構造データに内在する特徴を抽出し、マクロ機能との対応関係を構築することを創案した。ここでポイントとなるのは組織と機能の単純相関解析ではなく、機能の背後にある自由エネルギーランドスケープを良質な特徴量を用いてモデリングする点である。

微細組織の特徴抽出には、伝統的なフーリエ変換やイメージング模型に加えて、最新の位相幾何学パーシステントホモロジーを活用し、マルチスケールで特徴抽出を行っている^[1]。そして得られた特徴量を説明変数に、マクロ機能を説明可能な新たな模型「擬自由エネルギーランドスケープ」をモデリングする。モデル構築では、情報科学の関数を物性物理のアナロジーとして積極利用しており、機能の定量的予測や機能の支配因子の可視化が行え、機能の解釈に踏み込んだ解析が期待できる。本モデルから見出される多様な安定相を積極的に利用できれば、磁性材料や金属材料また分子システム材料など、様々な実材料の機能デザインが飛躍的に進展すると期待される。

なお講演では近年我々が取り組んでいる下記の研究事例について紹介する予定である。

- 1) 合成・計測・統計を融合した磁気相転移現象の解析
- 2) パーシステントホモロジーを用いた擬自由エネルギーの設計
- 3) 擬自由エネルギーを用いた多結晶磁性材料の保磁力解析

参考文献 T. Yamada, M. Kotsugi *et al.* Vacuum and Surface Science **62**, 153, (2019)

<https://doi.org/10.1380/vss.62.153>

