

# ニューラルネットワークを用いた炭素 K 端 ELNES/XANES からの物性予測

## Prediction of properties from carbon-K edge ELNES/XANES via neural network

東大工<sup>1</sup>, 東工大 IIR<sup>2</sup>, 東大生研<sup>3</sup> ◯(M1)菊政 翔<sup>1</sup>, (P)清原 慎<sup>2,3</sup>, 柴田 基洋<sup>1,3</sup>, 溝口 照康<sup>1,3</sup>

Grad. Sch. of Eng., the Univ. of Tokyo<sup>1</sup>, IIR, Tokyo Tech.<sup>2</sup>, IIS, the Univ. of Tokyo<sup>3</sup>

◯Kakeru Kikumasa<sup>1</sup>, Shin Kiyohara<sup>2,3</sup>, Kiyou Shibata<sup>1,3</sup>, Teruyasu Mizoguchi<sup>1,3</sup>

E-mail: kkiku@iis.u-tokyo.ac.jp

### 1. 緒言

電子エネルギー損失分光 (EELS) 及び X 線吸収分光 (XAS) のスペクトルにおける吸収端近傍微細構造は特に ELNES, XANES と称され、内殻から伝導帯への電子遷移に対応している。ELNES/XANES のスペクトル形状は非占有軌道の部分状態密度を反映しており、局所領域の配位や結合状態を解析できるため、触媒や電池材料の分析などに広く利用されている<sup>[1]</sup>。

近年、実験装置の性能向上に伴い、高い時間・空間分解能で一度に大量の ELNES/XANES スペクトルが取得可能になってきた<sup>[2,3]</sup>。一方、個々のスペクトルから構造や物性などの情報を抽出するには、高コストな理論計算<sup>[4]</sup>や参照スペクトルとの比較検討が不可欠であり、解析に多大な時間と労力を要する。そのため、大量のスペクトルの解析は非常に困難である。

このような背景から、スペクトルデータから機械学習を活用して高速に構造や物性の情報を抽出する「データ駆動型」の解析手法<sup>[5]</sup>が提案されている。しかし、多様な形状を示し、有機物など機能性材料の解析に不可欠な炭素 K 端スペクトルへの機械学習の活用は不十分であった。そこで本研究では、機械学習を用いて様々な有機分子の炭素 K 端スペクトル形状から物性値の予測を試みた。

### 2. 研究手法

QM9 データセット<sup>[6,7]</sup>の有機分子から 1,969 分子を抽出し、それらに含まれる計 8,215 の等

価でない炭素サイトについて炭素 K 端スペクトルを計算してデータベースとした。スペクトル計算には第一原理擬ポテンシャル法の CASTEP コード<sup>[8]</sup>を用い、平面波の打ち切りエネルギーを 500 eV、セルサイズを 15 Å に設定した。励起エネルギーを基準に -1 eV ~ 24 eV の範囲のスペクトルを 0.1 eV ステップで区切り入力データとし、また、各スペクトルに対応する原子または分子に関する物性値を出力データとし、順伝播型ニューラルネットワークを用いて学習を行った。使用するスペクトルデータは、訓練用、検証用、テスト用に分割して交差検証を行い、学習器の予測精度を評価した。

### 3. 結果と考察

順伝播型ニューラルネットワークを用いて、有機分子の炭素 K 端スペクトルから励起エネルギーや HOMO-LUMO ギャップを高精度で予測できた。一方、内部エネルギーなどの予測は低い精度にとどまったが、入力データに分子の組成の情報を追加することで、予測精度の改善に成功した。詳細な考察は当日発表する。

#### 参考文献

- [1] K. Sasaki *et al.*, *ACS Catal.*, **6** (2016), 69-76, [2] D. A. Muller *et al.*, *Science*, **319** (2008), 1073-1076, [3] F. Carbone *et al.*, *Science*, **325** (2009), 181-184, [4] T. Mizoguchi, *J. Phys.: Condens. Matter*, **21** (2009), 104204, [5] S. Kiyohara *et al.*, *J. Phys. Mater.*, **2** (2019), 024003, [6] L. Ruddigkeit *et al.*, *J. Chem. Inf. Model.*, **52** (2012), 2864-2875, [7] R. Ramakrishnan *et al.*, *Scientific Data*, **1** (2012), 140022, [8] M. D. Segall *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter*, **24** (2002) 2717.