

物質構造解析のためのインフォマティクス技術

Informatics Methods for Material Structure Analysis

岐阜大工¹, 理研 AIP² ◦志賀 元紀^{1,2}

Gifu Univ.¹, RIKEN², ◦Motoki Shiga^{1,2}

E-mail: shiga_m@gifu-u.ac.jp

新規の高性能材料を設計するために、物質の構造（原子配置・化学状態）を正確に同定し、構造特徴を適切に記述することが重要な課題である。なぜなら、注目する物性と高い相関のある構造特徴量（記述子）を設計し、様々な組成・条件で合成された材料のデータを蓄積すれば、機械学習に基づく材料探索が可能となり、材料探索の効率の大幅な向上を期待できるからである。こうした期待を念頭におき、著者らは、微細構造計測データ解析法（計測インフォマティクス）の開発、また、科研費・学術変革領域 A「超秩序構造科学」において構造秩序の記述法の開発に取り組んできた。本講演では、これら2つのトピックを中心に最近の研究成果を紹介する。

計測インフォマティクスとは、計測機器の発展とともに複雑かつ大規模化する計測データを取り扱うための情報科学の技術である。著者らは、構造解析したい試料の注目領域内を網羅的に分光スペクトル計測（スペクトルイメージ計測）したデータから注目領域の化学状態分布を同定する手法を開発してきた [1]。開発手法は、教師なし学習に基づく手法であり、試料に含まれる化学成分の情報を事前に必要としない自動解析手法である。また、様々な拘束条件を導入する機能拡張によって解析精度を向上できた解析例を本講演で紹介する予定である。さらに、本アプローチは、試料を様々な角度からスペクトルイメージ計測した CT データに対しても有効であることも示す。

講演の後半では、非晶質材料の構造秩序の記述に関する成果を紹介する。非晶質材料は、結晶材料のように並進対称性による長距離秩序が存在しないため、構造の記述が簡単にできない。この問題に対する有名な成果には、パーシステントホモロジーによって同定された空隙形状の分布による構造秩序解析が知られる。一方、著者らは、ネットワーク形成ガラスを対象とする化学結合のトポロジーに基づく解析法を開発してきた。開発法は、原子をノード、化学結合をエッジとするネットワークの中に含まれるリング（閉路）[2]を網羅的に列挙し、その大きさ、形状、周辺の原子分布などを用いて、構造秩序を評価するアプローチである。本講演では、様々な条件で合成されたシリカ (SiO₂) のガラスおよび結晶を用いた解析結果を紹介し、開発法の有用性を示す。

[1] S. Muto and M. Shiga, *Microscopy*, **69** (2), 110-122, 2020.

[2] S. L. Roux and P. Jund, *Computational Materials Science*, **49** (1), 70-83, 2010.