

## 超並列データ駆動科学による革新的二次元物質構造解析法

### Novel structure analysis method for two-dimensional material by massively parallel data-driven science

星健夫  
鳥取大学

#### 1. 研究目的

二次元物質構造解析向け量子ビーム回折実験を対象として、先端測定における超並列型データ解析手法を構築・応用している。現状では、KEKにおける新しい測定技術である全反射高速陽電子回折実験(Total reflection high-energy positron diffraction, TRHEPD,

トレプト)を対象としており、超並列計算機を前提としたソフト開発と応用を行っている。実験回折データ  $D_{\text{exp}}$  から対象物質原子座標  $X$  を求める、探索型逆問題解析を行う ( $D_{\text{exp}} \Rightarrow X$ ) (図 1)。本研究は、望月出海(KEK)・高山あかり(早稲田大)など、実験系研究者との共同研究である。

解析ソフトウェアは、

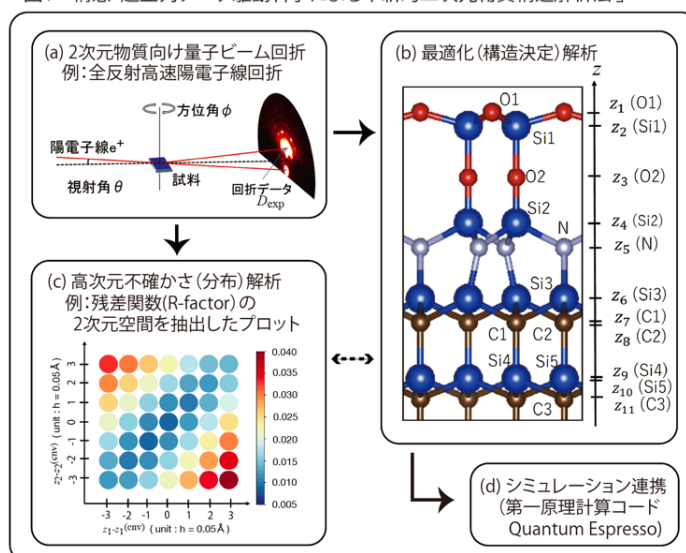
「2DMAT」 v.1.0 として、2021 年 3 月に公開された(\*1)。

(\*1) <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT>

#### 2. 研究成果の内容

TRHEPD への応用研究と手法拡張を行った[1-6]。特に、最適化アルゴリズムとデータ駆動型感度解析(分散・共分散行列の固有値解析)を組み合わせた 2 段階解析手法により、新規な 2 次元半導体物質である  $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3 / 6\text{H-SiC}$  (0001)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )  $\text{R}30^\circ$  系(図 1(b))の構造を解明した[1]。データ駆動型感度解析は一般に、TRHEPD 測定の表面選択性(表面付近の 1nm 以下領域のみをプローブしていること)をデータ駆動科学として定量的に示す。また、解析に用いた TRHEPD シミュレータを、公開した[2]。実験系研究者を想定した、講習会も開催している[7]。

図1 構想「超並列データ駆動科学による革新的二次元物質構造解析法」



### 3. 学際共同利用が果たした役割と意義

プログラムは超並列型計算機を前提としており、Oakforest-PACS2048 ノード利用までの並列計算を利用した。2048 ノードまでの並列計算が通常ジョブとしてできる機会は限られており、学際共同利用の利用は非常に有意義だったと考えている。

### 4. 今後の展望

2DMAT の解析アルゴリズムは汎用であり、TRHEPD 以外への応用として、表面エックス線回折(SXRD)・低速電子回折 (LEED) 実験へ対応した新バージョン(v. 2.1.0)をリリースしている(\*2)。次年度より、SXRD・LEED への適用も行う。

(\*2) Y. Motoyama, K. Yoshimi, H. Iwamoto, H. Ichinose, T. Hoshi, Data-analysis software framework 2DMAT and its application to experimental measurements for two-dimensional material structures, Preprint: <https://arxiv.org/abs/2204.04484>

### 5. 成果発表

#### (1) 学術論文

[1] T. Hoshi, D. Sakata, S. Oie, I. Mochizuki, S. Tanaka, T. Hyodo, K. Hukushima, Data-driven sensitivity analysis in surface structure determination using total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD), *Comp. Phys. Commun.* 271, 108186/1-7 (2022);プレスリリース(鳥取大/KEK)「高速データ解析で極薄膜物質の原子配列解析を加速～全反射高速陽電子回折における新しいデータ解析法の導入～」

[2] T. Hanada, Y. Motoyama, K. Yoshimi, T. Hoshi, sim-trhepd-rheed – Open-source simulator of total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD) and reflection high-energy electron diffraction (RHEED), *Comp. Phys. Commun.*, available online; <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2022.108371>

#### (2) 学会発表 (主な発表のみ)

[3] (招待講演) 星健夫, 超並列アルゴリズムによる計測インフォマティクスの数理的革新, 第9回東京大学数理情報学談話会, オンライン, 2022年2月22日.

[4] T. Takeda, M. Hamada, Y. Tujikawa, I. Mochizuki, T. Hoshi, T. Hyodo, A. Takayama, The layer-number dependence on structure of graphene/SiC studied by TRHEPD, The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9), 2021年11月30日.

[5] 星健夫, 望月出海, 岩本晴道, 一ノ瀬颯人, 阪田大志郎, 吉見一慶, 本山裕一, 福島孝治, 汎用データ解析ソフト 2DMAT と全反射高速陽電子回折実験への適用, 第6回計測インフォマティクス研究会 (人工知能学会第2種研究会), 2021年11月26日.

[6] 濱田雅史, 辻川夕貴, 武田朋也, 阪田大志郎, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり, TRHEPD による Pb/Si(111)表面超構造の構造解析:  $\sqrt{3} \times \sqrt{3} \leftrightarrow 3 \times 3$  の

構造相転移の起源, 日本物理学会秋季大会, 2021 年 9 月.

(3) その他

[7] オンライン講習会「2DMAT 講習会-CCMS Web ハンズオン」, 2021 年 4 月  
20 日; <https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/4570>

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus			
Oakforest-PACS	○	283,333	0
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			