

東京大学・生産技術研究所 ○溝口照康, 鈴木勲輝, 菊政翔, 柴田基洋

材料内部には表面や界面, 転位, 空孔などの格子欠陥が無数に存在しており, それら格子欠陥近傍の局所構造に起因して特異的な機能が発現する. これら格子欠陥における物性を理解することを目的とし, 第一原理計算や電子顕微鏡, シンクロトロンなどを用いた構造解析が行われている. 一方で近年, 機械学習などの情報科学手法が物質研究に盛んに利用されている. データベースの中から最良な物質を探したり, 最適な合成条件をいち早く決定したり, 近年では情報科学手法やデータベースを物質開発に利用することが不可欠になりつつある. 以上のような背景の中, 発表者らの研究グループでは, 第一原理計算や原子分解能計測, さらに機械学習を組み合わせた格子欠陥の構造・物性解析を行ってきた. 本発表では特に, 表面や分光に関する以下の2つのトピックスについて発表する.

- 1) 孤立系から得られる記述子を用いた表面物性の予測 [1]
- 2) スペクトルを記述子として用いた分子物性の予測 [2]

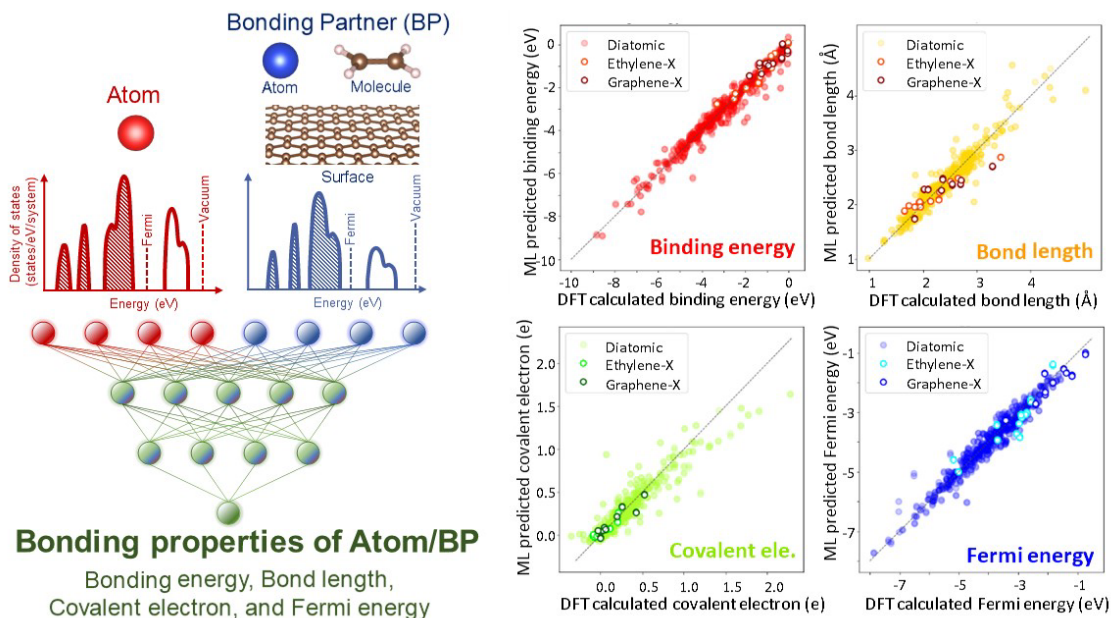
上記1)に関して, 下図に表面物性予測に関する研究の概略と結果を示す. 同研究では, 吸着前(孤立系)における各系の状態密度(DOS)を記述子として使用している. 図に示すように, 孤立系のDOSを用いることで, 吸着エネルギー, 結合距離, 吸着系のフェルミ準位, 共有結合電荷を正確に予測することに成功している[1].

さらに, 電子顕微鏡やシンクロトロンを用いて測定される内殻電子励起分光スペクトル(ELNES/XANES)を記述子とした研究にも取り組んでいる. QM9データベース内の約2万分子についてC-K端を計算し, 同スペクトルを記述子として約11種類の物性を予測した. ELNES/XANESとは無関係と考えられてきた分子量や内部エネルギーのような示量性物性も予測できることが明らかとなった[2]. また, 感度分析を用いることで, スペクトルと物性との相関性も明らかにしている.

本発表ではDOSやELNES/XANESといった1次元情報を記述子とした研究について主に紹介する.

参考文献

- 1) E. Suzuki, K. Shibata, and T. Mizoguchi, Appl. Phys. Exp. 14 (2021) 08550.
- 2) K. Kikumasa, S. Kiyohara, K. Shibata, and T. Mizoguchi, Advanced Intelligent Systems, 4 (2022) 2100103.



図(左)表面吸着物性予測の概念図と,(右)結合エネルギー, 結合距離, 共有結合電荷およびフェルミ準位の予測結果. 結合する前の孤立系における状態密度が, 吸着物性予測の優れた記述子であることをしめしている[1].