

陽電子回折むけ解析ソフトの高度化

Advancement of data analysis software for positron diffraction

¹鳥取大, ²KEK物構研, ³東大, ⁴電通大

¹星健夫, ¹田中和幸, ²望月出海, ²兵頭俊夫, ²一宮彪彦, ³福島孝治, ⁴山本有作

¹Tottori U, ²KEK, ³U Tokyo, ⁴UEC

¹T. Hoshi, ¹K. Tanaka, ²I. Mochizuki, ²T. Hyodo, ²A. Ichimiya, ³K. Hukushima, ⁴Y. Yamamoto

高速計算科学・データ駆動科学研究者(星・田中・福島・山本)と陽電子回折研究者(望月・兵頭・一宮)との融合研究として、陽電子回折向けデータ解析ソフトウェアの高度化に取り組んでいる。本研究では、全反射高速陽電子回折 (TRHEPD= Total-Reflection High-Energy Positron Diffraction, トレプト) を扱う。TRHEPD は RHEED の陽電子版に相当し、物質表面付近 (原子一層から数層) の原子座標を正確に決定することができる。近年著しい成果を挙げ、注目されている[1]。TRHEPD は日本発の測定手法であり、現状では世界で唯一 KEK 物構研にて実用的測定装置が稼働している。海外での建設も進んでいる。しかし、データ解析ソフトは未発達であり、測定装置の潜在能力が十分発揮されていない。

我々は高速計算を基盤として、回折データから原子座標を特定する逆問題解析ソフトウェアを開発している。ここでの回折データとは、視射角を変えた多数測定における最強 (00) スポット強度をさす(図 1(a))。順問題計算 (原子座標→回折データ) は、半無限系に対する散乱問題 [2] を解き、多数回の固有値問題に帰着される。逆問題は数理的には、関数最適化問題になる。原子座標 ($\mathbf{X} \equiv (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$) を変化させて、実験と理論の回折データの一致度に相当する関数 (R-factor) $R = R(\mathbf{X})$ を最小化する。現状の数理手法として、Nelder-Mead 法を用いている。予備的結果を示す(図 1(b))。今後、(i)順問題の高速化 (並列化)、(ii)逆問題の高度化 (レプリカ交換を伴うマルコフ連鎖モンテカルロ法の導入) に取り組み、階層的超並列計算プログラムとする。展望としては、測定時にデータ解析を内包させる「知性化」を目指し、世界標準の測定手法へと昇華させたい。

[1] 例えば, Mochizuki, *et al.*, PCCP 18, 7085 (2016); レビューとして, 一宮, 日本物理学会誌 70, 683 (2015). [2] Ichimiya, JJAP22, 176 (1983).

図 1(右図) (a) TRHEPD 実験の概念図. (b) 逆問題解析のテスト計算 (最適化プロセスの途中; 左→右). 実験データの代わりに, Reference (人工) データを用いた. Si(111)-Ag 系.

