

データ駆動型 XANES 解析

溝口照康, 清原慎, 菊政翔
東京大学生産技術研究所

X 線および電子線を用いて測定される吸収スペクトルである XANES/ELNES は、高い空間分解能や時間分解能、優れた検出感度を有する強力な分光法であり、触媒や電池開発に盛んに利用されている。一方で、実験スペクトルから原子構造や化学結合などの情報を獲得するためには、第一原理計算を用いた理論解析が不可欠である。近年では一粒子・二粒子・多粒子理論に基づく理論計算法が整備され、全構造・全元素・全吸収端の ELNES/XANES 理論計算が可能になりつつある[1]。また液体や気体のスペクトル計算も実施され、ELNES/XANES から原子振動や van der Waals 力に関する情報も抽出できることが明らかになってきた[2]。

一方で、実験では空間・時間分解のスペクトルが容易に測定できるようになり、一度の実験で数百から数万のスペクトルが取得されることも稀でなくなっている。そのような膨大な数のスペクトル1つ1つに対して、現象にそったモデルを構築して各原子サイトからスペクトルを計算し、実験結果を検証する、つまり「研究者駆動型スペクトル解析」を実施することは現実的に困難になりつつある。

近年、機械学習などの情報科学手法を物質開発に利用する「マテリアルズインフォマティクス」が世界中で研究されている。スペクトル解析に機械学習を利用した研究も古くから行われている。たとえば NMR の Chemical shift をニューラルネットワークにより予測する研究が 90 年代にいくつ報告されている[3]。最近では、X 線吸収分光 (XAFS) の計算スペクトルのデータベースも公開され、さらに XAFS 解析に機械学習を利用した研究も報告されつつある[4]。

発表者らは機械学習を活用した「データ駆動型スペクトル解析法」を開発してきた。発表では機械学習を活用したスペクトル解釈法[5]や、スペクトル予測、さらにスペクトルから物性を予測する手法[6]などを報告する予定である。

- [1] H. Ikeno and T. Mizoguchi, *Microscopy*, 66 (2017) 305. T. Mizoguchi et al., *Micron*, 41 (2010) 695.
- [2] T. Mizoguchi, et al, *Ultramicroscopy*, 180 (2017) 93. H. Katsukura, et al, *Sci. Rep.*, 7 (2017), 16434. Y. Matsui et al., *Sci. Rep.*, 3 (2013) 3503. H. Katsukura et al., *Ultramicroscopy*, 178 (2017) 88.
- [3] L.S. Anker, P.C. Jurs, *Anal. Chem.* 64 (1992) 1157–1164.
- [4] C. Zheng, K. Mathew, C. Chen, Y. Chen, H. Tang, A. Dozier, J.J. Kas, F.D. Vila, J.J. Rehr, L.F.J. Piper, K.A. Persson, S.P. Ong, *npj Comput. Mater.* 4 (2018) 1–9.
- [5] S. Kiyohara, T. Miyata, K. Tsuda, T. Mizoguchi, *Sci. Rep.* 8, (2018) 1–4.
- [6] S. Kiyohara, M. Tsubaki, K. Liao and T. Mizoguchi, *J. Phys.: Materials*, 2, 024003-1-9 (2019) .