

2023年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」

調査研究報告書（公開版）

【研究題目】汎用表面構造解析プログラム「2DMAT」高度化に向けての調査研究 II

【整理番号】TK23-006

【代表機関】高エネルギー加速器研究機構(KEK)

【調査研究代表者（氏名）】望月出海

【TIA 内連携機関：連携機関代表者】東京大：福島，東北大：花田，産総研：平川

【TIA 外連携機関】核融合研，早稲田大，同志社大

【報告書作成者】望月出海

【報告書作成年月日】2024 年 3 月 25 日

【連携推進（具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等）】

KEK，東京大，東北大，産総研，さらに核融合研，早稲田大，同志社大との連携により，汎用構造解析フレームワーク「2DMAT」(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/>)の高度化を進めた。本フレームワークは，2次元系物質などへの最先端の物性計測技術を中心に，その解析を汎用かつ高精度・高信頼に，超並列計算機をもちいて高速・高効率に行うために開発された。2021年度から，かけはし調査研究においても様々な高度化が実施されてきた。

連携推進活動として，新たな先端計測に対する2DMATの適用範囲拡大，ユーザーが真に必要とするソフトウェア機能の需要調査，それに基づいた新機能実装のための調査を進めた。また，2DMATの新規ユーザー獲得と使用方法のレクチャーのため，2024年3月28日に「CCMS Web ハンズオン- 2DMAT 講習会」(<https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/6432>)が開催される。

こうした活動により，参画メンバーを核とした連携研究体制を構築し，競争的資金等への申請を行った。残念ながら本年度の採択には至らなかったが，今後も最適な連携体制を構築して大型競争的資金の獲得を目指す。

【調査研究内容（実験等中心に背景・課題と実行された課題解決の内容と結果）】

近年発展している統計数理科学を応用した計算科学技術とスパコンを活用しつつ，先端計測に関するハードウェア&ソフトウェアの相互連携の強化，ユーザーの利便性向上，2DMATのさらなる高速化・自動化・汎用化といった方策について調査を進めた。具体的には，KEK 共同利用実験において2DMATの実地利用を進め，そのフィードバックを得て，利便性・汎用性向上のためのマニュアル整備を進めた。また2DMATの機能に超並列モンテカルロ型ベイズ推定などが実装され，これを新たな最先端計測技術である

低速陽電子回折(LEPD)法や偏光全反射蛍光X線吸収微細構造(PTRF-XAFS)法に適用するためのソフトウェア整備を進めた。こうした活動により、従来、熟練した専門家が試行錯誤していた解析を、一般ユーザーが簡便に短時間に行えるようになりつつある。

共同研究 (4 件)

- (1) 星健夫, 福島孝治, 山本有作, 吉見一慶, 深谷猛, 工藤周平, 望月出海, 高山あかり, 高草木達, 朝倉清高「超並列データ駆動科学による 2 次元物質先端計測の革新」, 「富岳」一般課題 [計算機利用課題, hp230304](重点分野: AI やデータサイエンスを活用して、科学的・社会的課題の解決に資する研究開発) 2023 年 10 月 - 2024 年 9 月
- (2) 星健夫, 望月出海, 福島孝治, 吉見一慶, 高草木達, 朝倉清高「超高速データ駆動科学と先端計測技術の融合による触媒科学イノベーション」, 触媒科学計測共同研究拠点 触媒科学計測共同研究拠点共同利用・共同研究 (提案型) 2023 年 11 月 - 2024 年 3 月
- (3) 星健夫, 望月出海, 福島孝治, 吉見一慶, 朝倉清高「超高速データ駆動科学と先端計測技術の融合による触媒科学イノベーション」, 触媒科学計測共同研究拠点 触媒科学計測共同研究拠点共同利用・共同研究 (提案型) 2023 年 6 月 - 2023 年 10 月
- (4) 星健夫, 福島孝治, 山本有作, 吉見一慶, 深谷猛, 工藤周平, 望月出海, 高山あかり, 兵頭敏夫「超並列ベイズ推定による 2 次元物質先端計測の革新」 「富岳」一般課題 [計算機利用課題, hp220248] 2022 年 10 月 - 2023 年 9 月

競争的資金 (1 件)

- (5) 望月出海, 他「全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法によるセリア表面における水素の構造解明」日本学術振興会 科学研究費助成事業 基盤研究(B) 2024 年 4 月 - 2026 年 3 月

論文 (2 報)

- (1) 星健夫, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 福島孝治, 陽電子科学 **21**, 3-9 (2023).
- (2) M. Dodenhöft, I. Mochizuki, K. Wada, T. Hyodo, P. Richter, P. Schädlich, T. Seyller, and C. Hugenschmidt, Phys. Rev. B **108**, 155438 (2023).

【今後の活動予定】

KEK 物構研低速陽電子実験施設においては、全反射高速陽電子回折(TRHEPD)実験装

置と LEPD 実験装置が共同利用実験(本年度の KEK-PF/SPF 共同利用実験 15 回)に供され、2DMAT を利用した高度解析が行われた。今後も 2DMAT のさらなる高度化・多機能化を進めると共に、高性能触媒材料・パワーデバイス材料・スピントロニクス関連材料など有望な 2 次元物質材料を対象とした先端計測研究を推進する。こうした活動により最適な研究連携体制を構築し、大型競争的資金等の獲得を目指す。

【SDGs17 目標について、調査研究成果について、貢献ができると思われる項目があれば、最大 3 つまでをご記載下さい。】

研究成果に関連する SDGs 目標がある。

関連する SDGs 目標は無い

1 <input type="checkbox"/> 貧困をなくそう	2 <input type="checkbox"/> 飢餓をゼロに
3 <input type="checkbox"/> すべての人に健康と福祉	4 <input checked="" type="checkbox"/> 質の高い教育をみんなに
5 <input type="checkbox"/> ジェンダー平等を実現しよう	6 <input type="checkbox"/> 安全な水とトイレを世界中に
7 <input type="checkbox"/> エネルギーをみんなに、そしてクリーンに	8 <input type="checkbox"/> 働きがいも経済成長も
9 <input checked="" type="checkbox"/> 産業と技術革新の基盤を作ろう	10 <input type="checkbox"/> 人や国の不平等をなくそう
11 <input type="checkbox"/> 住み続けられるまちづくりを	12 <input type="checkbox"/> つくる責任、つかう責任
13 <input type="checkbox"/> 気候変動に具体的な対策を	14 <input type="checkbox"/> 海の豊かさを守ろう
15 <input type="checkbox"/> 陸の豊かさを守ろう	16 <input type="checkbox"/> 平和と公正をすべての人に
17 <input type="checkbox"/> パートナリシップで目標を達成しよう	

以上