

# 数学のグラフ解析の結晶構造解析への適用

## Lattice determination based on graph analysis

富安(大石)亮子・山形大学/JST さきがけ  
神山崇・高エネルギー加速器研究機構

粉末指数付けソフトウェア CONOGRAPH(コノグラフ)[1]の原理の紹介を行う。CONOGRAPHは、既存の代表的ソフトウェア TREOR, DICVOLと比較したとき、同程度もしくはより少ない徹底探索時間において、成功率を20%以上向上させたソフトウェアである[2]。使用したテストデータは質の悪いデータも含むため、他ソフトウェアが6--8割成功する状況で100%の成功率を実現したと考えてよい。開発にあたっては、ab-initio indexing[2], ピークサーチ[1]を含む4つの異なる解析ステージに対し、それまでの状況を改善する新しい方法の提案も行った ([3], [4]など)。数学の持つ一般性から、粉末回折のために開発されたこれらの方法は、電子線後方散乱回折にも適用が開始されている。講演では、ab-initio indexingの部分を中心的に紹介する。

実験データから抽出される結晶格子に関わる情報は、各回折装置の幾何学的状況により異なるが、粉末の場合、各ミラー指数の格子面間隔(逆格子を考えれば、 $d^*$ 値と呼ばれる逆格子ベクトルの長さ)が得られる。結晶構造解析の基盤は、応用数学で連続最適化と総称される分野の様々な方法になるが、一般に離散構造を扱う場合、その方法が有効でないことがあり、格子決定を行う粉末指数付けにおいても同様の状況が発生する。

そこで我々は、実験データから得られた  $d^*$ 値が形成するネットワークをグラフ(図1)で表現し、消滅則の問題、バックグラウンドノイズに伴うピークの消失、不純物ピークなどを処理する統計・数学的議論を、このグラフ上において実行する、という方法を取った。この離散数学に基づく方法は、消滅則に伴う状況とも相性がよく、対称性による場合分けを必要としない手法開発に有効であることが確認できた。

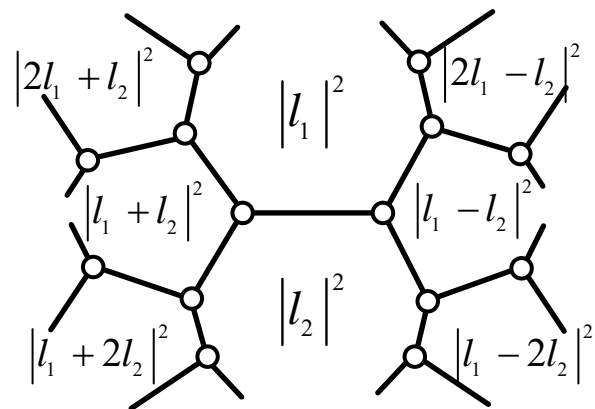


図1 手法開発に用いたトポグラフ

[1] A. Esmacili, T. Kamiyama, R. Oishi-Tomiyasu, J. Appl. Cryst. 50 (2017), pp. 651-659. (CONOGRAPHのダウンロードページ: <https://z-code.kek.jp/zrg/>)

[2] R. Oishi-Tomiyasu, Acta Cryst. A69 (2013), pp. 603—610.

[3] R. Oishi-Tomiyasu, J. Appl. Cryst. 47 (2014), pp. 2055--2059.

[4] R. Oishi-Tomiyasu, Acta Cryst. A68 (2012), pp. 525—535.