

# 進化的アルゴリズムとガウス過程回帰による Ag(111)表面上シリセンの構造探索

大阪大学 工学研究科物理学系専攻 濱本 雄治

**目的** 機械学習に基づく構造探索手法を用いて、Ag(111)表面上におけるシリセンの非自明な安定構造を理論的に解明する。

**内容** Ag(111)表面上に乱雑に分布したSi原子を初期構造として、進化的アルゴリズムとガウス過程回帰を用いてシリセンの安定構造を探索した。さらにグラウンドポテンシャルを計算して得られた超構造の安定性を比較した。

**結果** Ag(111)表面上シリセンの既知の安定構造に加えて、未報告の準安定構造が多数存在することが判明した。本結果は走査型トンネル顕微鏡像の不鮮明領域を解釈するための重要な知見を与える。

**利用した計算機** SQUID汎用CPUノード群  
ノード時間 700時間  
並列化 64コアMPI並列

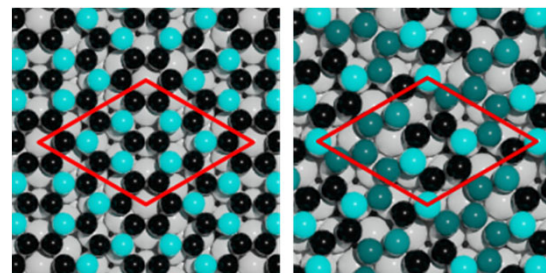


図 得られた安定構造の例。明るい(暗い)水色は高い(低い)Si原子。