

2022 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	川崎猛史
研究機関名	名古屋大学
所属部署名	大学院理学研究科理学専攻
役職名	講師
研究課題名	多様な非晶性固体の構造抽出スキームの開発
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

**研究成果の概要**

本年度は、基本的な非晶性固体中から遅いダイナミクスを司る静的構造を抽出する機械学習手法の構築し、さらに、機械学習での分類で用いられる非線形変換の数理構造を特定するスキーム開発のための準備的研究を行った。具体的には、Grad-CAM（勾配加重クラス活性化マッピング）法と呼ばれる画像解析分野において従来用いられてきた機械学習手法を、非晶質固体研究において初めて適用した。その結果、2種類の基本的な金属ガラス系の不均一ダイナミクスの起源となる静的構造の抽出に成功した。さらにその特徴構造が粒子構造の自由体積と強く相関することを見出し、成果を論文にまとめ採択された [N. Oyama, S. Koyama, and T. Kawasaki, *Front. Phys.* 10, 1007861 (2023)]. 次年度は、本手法を、上記と同等の系における様々な温度領域の過冷却液体に対して適用することにより、冷却に対する静的構造の成長を当該手法で適用できるかを精査する。加えて、シリカや水など、より多様な非晶性固体系に対しても当該手法を適用することにより、前年度において得られた結果の普遍性と多様性を明らかにする予定である。