

T-Learner を用いた応力誘起強誘電状態 SrTiO₃ におけるフレキシソ電気効果の因果量推定

鹿児島大院理工^A, 鈴鹿高専^B
清家 一真^A, 真中 浩貴^A, 三浦 陽子^B

Identification of flexoelectric effects in the stress-induced ferroelectric state SrTiO₃ using causal inference in statistics.

Kagoshima Univ.^A and NIT, Suzuka Col.^B
Kazuma Seike^A, Hirotaka Manaka^A, Yoko Miura^B

これまで本グループでは SrTiO₃ で出現する応力誘起強誘電転移機構を明らかにするため、複屈折イメージング測定を行ってきた。本物質に[001]方向から外力を加えると応力が不均一に発生するため、強誘電転移温度(T_F)も不均一に広がっていることを報告してきた[1]。他の多くの研究より、応力誘起強誘電領域では発生した応力や歪による圧電効果による分極だけでなく、ひずみ勾配によるフレキシソ電気効果に分極が重畳すると考えられているが、それらの寄与は分離できていなかった。

本グループでは複屈量の空間分布から応力や歪の大きさだけでなく、それらが集中している領域が特定できることに注目し、機械学習の一つである統計的因果推論を用いて、圧電効果とフレキシソ電気効果の寄与を分離することを試みている[1]。前回の学会では、14.1 K、40.0 K、90.0 K、130.1 K の4つの温度で取得した複屈折量と T_F との関係について、構造方程式モデリング(SEM)と有向非巡回グラフ(DAG)を用いて、相関関係と因果関係について議論した。さらに 40.0 K と 14.1 K における位相差を用いた Two-model learner (T-Learner) の解析結果も報告した。この解析では、すでに報告されている K-shape 法を用いたクラスタリングの結果を利用し、クラスタ E1 と E2 では応力が集中する処置群、クラスタ E3 と E4 では応力が均一である未処置群とした。その結果、処置群と未処置群との間で T_F の差が 1.83 K [1.63 K, 2.04 K] であり、そのうち圧電効果の寄与が 0.36 K [0.18 K, 0.54 K]、フレキシソ電気効果の寄与が 1.49 K [1.23 K, 1.75 K] と結論付けた。この議論では、処置群と未処置群とのクラスタ分けによって推定結果が変わる課題があった。最近、偏光顕微鏡では隣接する画素間で偏光が重なり合うため、その寄与を考慮したクラスタリングに成功した。そこで本研究では、新たなクラスタリング結果を基にして、再度、同じ因果推論を行い、クラスタ分けの違いによって、推定値がどのように変化するかを評価した。下図には 5×5画素分の偏光情報を畳み込んでクラスタリングを行った結果を基にした、T-Learner の結果を示す。この結果より、処置群と未処置群の間で T_F の差が 1.99 K [1.87 K, 2.11 K] であり、そのうち圧電効果による上昇分が 0.83 K [0.80 K, 0.85 K]、フレキシソ電気効果の上昇分は 1.16 K [1.02 K, 1.31 K] となった。新たなクラスタリング結果では、 T_F が高い領域だけより選別する傾向があったために 2 群間の差は大きくなったが、フレキシソ電気効果の影響は相対的に減少した。これは T-Learner を用いた反実仮定の弱点であるため、X-Learner での解析も今後、検討が必要である。

[1] K. Toyoda 他: Sci. Technol. Adv. Mater Meth. **3**, 2278322 (2023),
H. Manaka 他: *ibid.* **4**, 2342234 (2024),
K. Seike 他: *ibid.* **5**, 2503698 (2025).

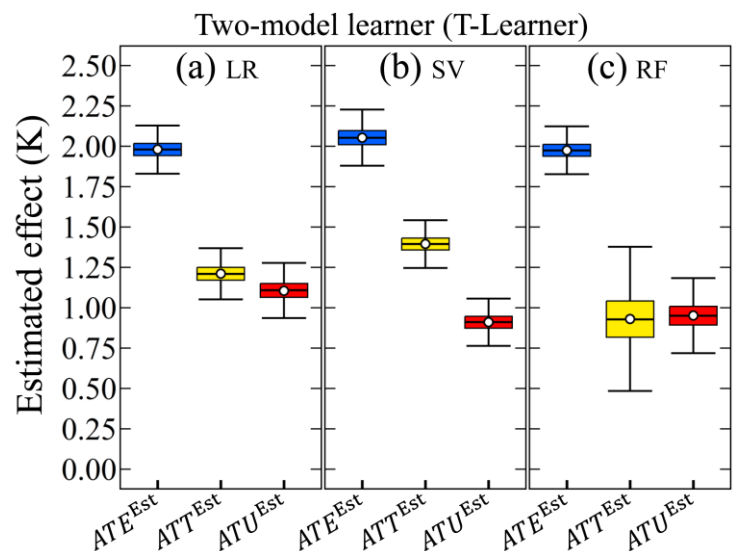


Figure. Box-and-whisker plots of effect sizes using T-Learner with (a) linear regression (LR), (b) support vector machine (SV), (c) random forest (RF).