

2023 年度年次報告書

社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出

2022 年度採択研究代表者

唯 美津木

名古屋大学 物質科学国際研究センター

教授

反応リマスターによるエコ材料開発のフロンティア共創

主たる共同研究者:

五十嵐 康彦 (筑波大学 システム情報系 准教授)

グエン ズオングエン (北陸先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 助教)

ダム ヒョウチ (北陸先端科学技術大学院大学 知識科学系・共創インテリジェンス研究領域 教授)

原田 慈久 (東京大学 物性研究所 教授)

研究成果の概要

放射光 X 線分光イメージング計測とインフォマティクスの融合により、これまで観ることが困難であった材料の反応や現象を、今までにないマルチな時空間スケールでイメージングし、時空間で揺らぐ反応の全体像を見える化する反応リマスター計測解析の確立と材料開発課題への展開が本研究の目的である。2023 年度は、反応リマスター計測解析の基盤要素技術として、(1) 硬 X 線 XAFS 分光イメージングの開発と高度化 (AKB ミラー結像光学系を用いた XAFS-CT イメージングの開発、オペランド計測系の開発)、(2) 軟 X 線イメージング・発光分光の立ち上げ、(3) イメージングビッグデータ解析のためのインフォマティクス技術の開発 (画像データ解析プロトコルの高度化、深層学習モデルを基にした 3D イメージング画像の潜在空間構築とデータマイニング解析法の開発 [1,2], それらを基にした動的な反応場変化のデータ駆動シミュレーション開発)を行った。また、物質設計や材料開発の課題となっている対象を計測解析のユースケースとして設定し、これらの計測解析の基盤要素技術の評価を行い、反応リマスター計測解析の展開を図った。具体的には、(4) ゴム/金属複合材料における硫化反応と接着老化のリマスター[1]、(5) MOF 多孔性材料における吸着拡散のリマスター[3]、(6) 複数の金属が協働する酸化物触媒の反応リマスターと材料設計シミュレーションへの展開を進めた。(4)については、自動車タイヤのゴムとスチールコードの接着のモデル試料であるブラス含有ゴム試料について、湿熱老化過程の Cu の硫化反応を XAFS-CT イメージングと AI によるデータマイニングによる反応リマスターによって解析し、Cu の硫化が 5 種類の反応パターンに分類できることを明らかにした。これまで直接捉えることの出来なかったゴムと金属の接着に関わる化学反応を可視化することに成功した[1]。(5)では、MOF-74-Co の結晶一粒子内におけるゲスト分子の吸着拡散の様子を世界で初めて三次元的に可視化し、吸着材料結晶内におけるゲスト分子の吸着メカニズムを明らかにした[3]。

【代表的な原著論文情報】

- 1) H. Matsui, Y. Muramoto, R. Niwa, T. Kakubo, N. Amino, T. Uruga, M.-Q. Ha, D.-T. Dinh, H.-C. Dam, and M. Tada, “Machine Learning-derived Reaction Statistics for 3D Spectroimaging of Copper Sulfidation in Heterogeneous Rubber/brass Composites”, *Commun. Mater.* 4:88 (2023).
- 2) T.-S. Vu, M.-Q. Ha, D.-N. Nguyen, V.-C. Nguyen, Y. Abe, T. Tran, H. Tran, H. Kino, T. Miyake, K. Tsuda, H.-C. Dam, “Towards Understanding Structure–Property Relations in Materials with Interpretable Deep Learning”, *npj Computational Mater.*, 9, 1, 215, 2057-3960 (2023).
- 3) E. Yamada, H. Sakamoto, H. Matsui, T. Uruga, K. Sugimoto, M.-Q. Ha, H.-C. Dam, R. Matsuda, and M. Tada, “Three-Dimensional Visualization of Adsorption Distribution in a Single Crystalline Particle of a Metal-Organic Framework”, *J. Am. Chem. Soc.* 146, 9181-9190 (2024).