

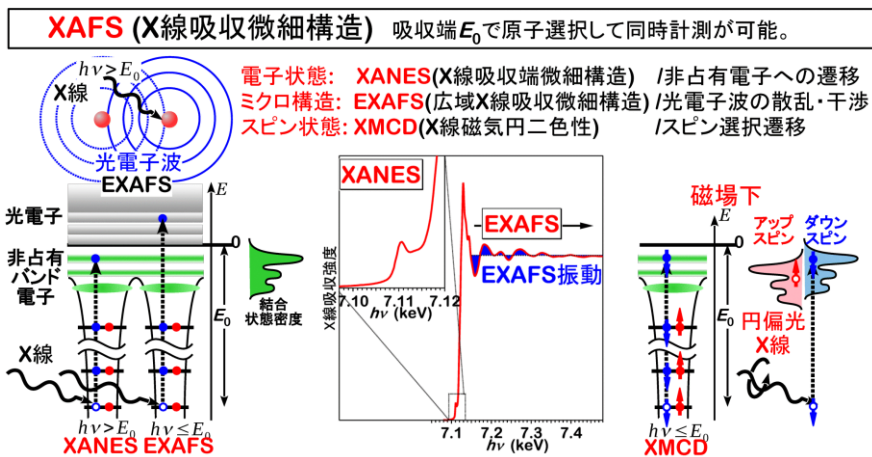
赤井 一郎

熊本大学パルスパワー科学研究所
教授

データ駆動科学による高次元X線吸収計測の革新

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、機能性材料の最適化研究で計測される放射光 X 線吸収データから、材料のマイクロ物性、メゾ構造、マクロな材料機能の発現までをシームレスに解明する方法論を開発する。材料の構造や電子・スピン状態をプローブできる、図1に示した X 線吸収微細構造



造 (XAFS) 計測を主な対象とし、XAFS スペクトルからミクロな物性特徴量を抽出する段階(1)と、材料機能の発現で鍵となるメゾ構造を捉える顕微スペクトル (μ -XAFS) を解析する段階(2)でデータ駆動科学を融合し、それらを高性能磁石材料と二次電池の固体電解質材料の先端研究に応用する。

従来 XAFS では、機能に関わる物性特徴量の推定においてマイクロ構造の仮定を必要とする一方、機能に関わる微弱なスペクトル成分の解析では、解析の任意性が問題となっていた。更に材料のメゾ構造解析で行われる μ -XAFS 計測等ではデータが膨大で、データに内包される物性情報を十分に抽出できていない状況であった。本研究では、最新の情報科学を駆使し、データを起点として作適的な前提・仮定を排除したデータ駆動科学的アプローチで XAFS データを解析する。

初年度である 2018 年度下半期では、段階(1)として、EXAFS のスパースモデリング(SpM)と、XANES, XMCD のベイズ分光(ベイズ推定をスペクトル分解に適用)を行った。SpM では様々な結晶系で、マイクロ構造と、構造ゆらぎやイオン可動性を表す物性量の高精度推定に成功した。一方ベイズ分光では、XANES 吸収端と微弱なプレッジ構造を包括的に解析する方法を開発し、XMCD スペクトルに含まれるスペクトル要素数をデータ駆動科学的に推定するモデル選択を試みた。更にモデル選択を、より本質的に物性を記述する方程式(ハミルトニアン)の選択に応用¹⁾した。段階(2)では、二次電池材料の μ -XANES データからメゾ構造を抽出するため、マルコフ確率場モデル(MRF)を拡張した解析法の開発に取り組んだ。従来 MRF は、隣接ピクセル値が類似する事前情報を用いてノイズが重畳する画像データの解析に用いられる。一方本研究では、材料機能を支配する重要な物性特徴量が材料のメゾ構造内で類似する事前情報を組み込んだことを意味し、材料の機能発現において、メゾ構造が担う役割の解明が期待できる。

【代表的な原著論文】

- 1) Yoh-ichi Mototake, [Masaichiro Mizumaki](#), [Ichiro Akai](#), and Masato Okada, “Bayesian Hamiltonian Selection in X-ray Photoelectron Spectroscopy”, *Journal of Physical Society of Japan* vol. 88, 034004/1-12, (2019).

§ 2. 研究実施体制

(1) データ駆動科学グループ

- ① 研究代表者：赤井 一郎（熊本大学・パルスパワー科学研究所 教授）
- ② 研究項目
 - ・他のグループと協力し、研究全体の方向づけを行う。
 - ・広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS) のスパースモデリングによるマイクロ構造の抽出。
 - ・X 吸収端近傍構造 (XANES)、X 線磁気円二色性 (XMCD) のベイズ分光による、電子状態・スピン状態の物性量の抽出。

(2) X 線吸収計測・統合解析グループ

- ① 主たる共同研究者：妹尾 与志木（佐賀県地域産業支援センター・九州シンクロトロン光研究センター 副所長）
- ② 研究項目
 - ・多角的な X 線吸収微細構造 (XAFS) 計測を行い、データ駆動科学にもとづく解析法を適用。
 - ・様々な結晶系の EXAFS 計測と物性特徴量の抽出。
 - ・軟 X 線領域の XANES 計測。

(3) メゾスケール計測・機能解析グループ

- ① 主たる共同研究者：水牧 仁一朗（高輝度光科学研究センター・利用研究促進部門 主幹研究員）
- ② 研究項目
 - ・顕微 XAFS (μ -XAFS) 計測を行い、特徴量画像へのデータ駆動科学解析を適用。
 - ・標準試料 $\text{Co}_{80}\text{Pt}_{20}$ ナノドット薄膜の μ -XAFS 計測。
 - ・標準試料ガーネットフェライト RIG の調製。

(4) 特徴量画像解析グループ

- ① 主たる共同研究者：青西 亨（東京工業大学・情報理工学院 准教授）
- ② 研究項目
 - ・ μ -XAFS 計測データから、特徴量の空間マッピングと空間相関を解析する方法を開発。
 - ・スペクトル特徴量の空間マッピング解析アルゴリズムの設計。
 - ・標準試料で計測された μ -XAFS データの空間マッピング解析。