

計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の
開発と応用

2018 年度採択研究代表者

2019 年度 実績報告書

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

本研究の目的は、機能性材料の開発で課題となる、物質の機能特徴づける原子スケールのミクロ物性と材料性能特徴づけるメゾ構造をシームレスに解析し、材料機能最適化研究で新しい指針を示すことにある。それを実現するために、材料のミクロ構造、電子状態、スピン状態をプローブできる X 線吸収微細構造 (XAFS) スペクトルと、メゾ構造を捉えられる顕微 XAFS (μ -XAFS) データに様々な情報科学を融合する。

まず、情報量規準としてベイズ自由エネルギーを用いてモデル選択が可能なベイズ分光法を開発し、X 線吸収端より低エネルギーに現れるプレッジ構造のより精細なスペクトル分解を実現した。このプレッジ構造は磁性材料で重要な情報を与える。さらに X 線磁気円二色性でも、スピン分裂状態に対応するモデル選択を実現し、差分スペクトルの解析でスピン状態を表す多重項によるピーク分裂がより精度良く分離できることを示した。このベイズ分光法は、X 線回折データにも適用可能で、酸化物半導体薄膜における格子歪緩和も明らかにした¹⁾。一方広域 X 線吸収微細構造では、電子波の二体多重散乱過程を表す基底関数を用いて、近接原子の動径分布のスパースモデリングを行い、最近接以遠で配位する原子の構造ゆらぎ等を、構造の事前情報無しに抽出することに成功した。

一方メゾ構造の解明では、磁性材料とモデル二次電池材料の μ -XAFS の解析を進めた。前者では、磁区パターン形成ダイナミクスを時間依存ギンツブルグ・ランダウ方程式でモデル化し、そのパラメータ推定に深層学習を適用した。一方後者では、充電反応の時空間ダイナミクスを等価回路でモデル化し、そのモデルをマルコフ確率場モデルへ深化させて、イオン伝導ダイナミクスを解析する方法の開発に取り組んだ。

さらに、充電過程を計測した μ -XAFS データに図 1 に示した非負値行列因数分解を適用し、異なるスペクトル特性を持つ空間パターンが存在²⁾することを初めて明らかにした。その際、充電に伴うわずかな μ -XAFS データの変化を捉える新規アルゴリズムを用いた。

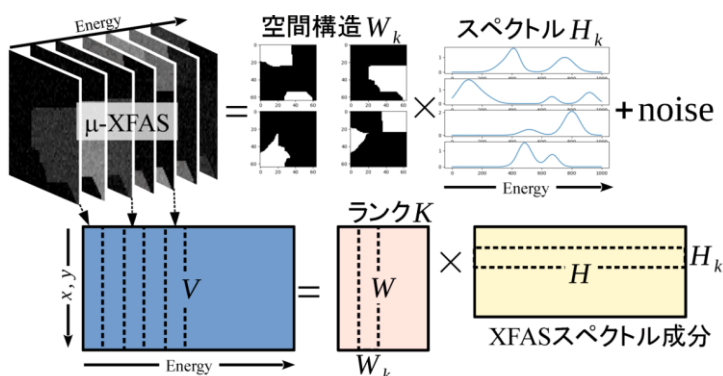


図 1: μ -XAFS 多次元スペクトルの非負値行列因数分解

【代表的な原著論文】

- 1) S. Yakura, K. Iwamitsu, S. Hira, T. Yamasaki, Y. Miyata, E. Magome and I. Akai, “Strained lateral structure and its relaxation in a Cu_2O thin crystal epitaxially grown on MgO surface”, Jpn. J. Appl. Phys. vol. **59**, 025506/pp.1-5, 2020.
- 2) 谷本寛樹, 水牧仁一朗, 妹尾与志木, 赤井一郎, 青西 亨, “リチウムイオン二次電池の 2D-XAS イメージの非負値行列因子分解”, 信学技報, vol. **119**, No. 453, NC2019-95, pp. 113-118, 2020.

§ 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ン光研究センター 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 計測と解析。

(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 の調製と計測。

(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。