

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

2021 年度 年次報告書

赤井 一郎

熊本大学 産業ナノマテリアル研究所
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

材料デバイスの機能高度化では、マイクロ物性研究の深化と、デバイス機能を支配するメゾ構造とマクロ機能研究の深化、更にそれらのシームレス解析が必須である。そのため本研究では、材料デバイスで計測されるX線吸収スペクトル(XAS)とその顕微計測にデータ駆動科学を適用する。

まず、材料のマイクロ構造の情報が含まれる広域X線吸収微細構造の解析に深層学習を適用し、動径分布に加えて結合角分布の推定を実現した。一方、X線吸収が少なくマイクロ構造の解析が困難なフォトリソミック薄膜デバイスにおいて、電子散乱の位相シフト等を含む基底関数を用いたベイズ的スパースモデリングで、高いノイズ耐性で元素種を識別した動径分布関数を推定し、材料中の部分配位構造の推定に成功した。また磁性材料においてスピン磁気モーメントとそれを構成する電子軌道の形状を計測可能な磁気コンプトン散乱計測にベイズ分光法解析を適用し、磁気モーメントの統計学的推定精度を担保して、計測時間を約1/20に短縮できることを示した。

磁石材料で出現するメゾスケールの磁区ドメイン構造には、マイクロな磁性特徴量の情報が含まれる。そこで、心理的画像特徴量に基づいた高次元画像特徴量解析を導入して磁区ドメインのテクスチャ解析を定量化し、その主成分解析から抽出される第一成分によって、マイクロな特徴量である磁気異方性をロバストに推定することに成功した。一方リチウム電池では、活物質における充電過程を担うマイクロな電子状態と、充電過程におけるそのマイクロな電子状態の空間分布をシームレス解析することが求められる。本研究では、リチウム電池モデル電極デバイスの充電過程を捉えた二次元XASデータを、開発した片側直交性非負値行列因子分解を用いて空間構造とスペクトル成分に因子分解した。更にその分解されたスペクトル成分のベイズ分光解析を行い、充電に関わるマイクロな電子状態の空間分布の評価に成功した。

§ 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 産業ナノマテリアル研究所 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) のベイズ的スパースモデリング解析。
- ・X 吸収端近傍構造 (XANES)、X線磁気円二色性 (XMCD) のベイズ分光解析。

(2) X線吸収計測・統合解析グループ

① 主たる共同研究者: 岡島 敏浩 (科学技術交流財団 あいちシンクロトロン光センター 副所長)

② 研究項目

- ・多角的な X 線吸収微細構造 (XAFS) の計測と、データ駆動科学にもとづく解析。
- ・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

- ・心理特徴量にもとづく磁区パターンの定量評価法の確立。
- ・放射光計測へのデータ駆動科学的解析法のフィードバック。

(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

- ・片側直交性非負値行列因子分解法によるスペクトル特徴量の空間マッピング。
- ・畳み込みニューラルネットワークによる磁区パターン形成の逆問題解法。
- ・リチウムイオンモデル二次電池充電ダイナミクスの解析法開発。

(5) 時間分解顕微可視化グループ

① 主たる共同研究者: 山崎 裕一 (物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 主幹研究員)

② 研究項目

- ・トポロジカル磁性体や磁石材料などの物性発現機構の解析
- ・高い時空間分解能を有する放射光コヒーレント軟X線回折イメージング手法の開発

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Bayesian sparse modeling of extended x-ray absorption fine structure to determine interstitial oxygen positions in yttrium oxyhydride epitaxial thin film”; *AIP Adv.* **11**, 125013/1–5 (2021).
- 2) “Bayesian spectroscopy of synthesized soft X-ray absorption spectra showing magnetic circular dichroism at the Ni-L₃, -L₂ edges”; *STAM: Method* **1**, 75–86 (2021).
- 3) “Extracting Local Symmetry of Mono-Atomic Systems from Extended X-ray Absorption Fine Structure Using Deep Neural Networks”; *Symmetry* **13**, 1070/1–10 (2021).
- 4) “Bayesian Orbital Decomposition and Determination of End Condition for Magnetic Compton Scattering”; *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 094802/1–6 (2021).
- 5) “Non-negative matrix factorization for 2D-XAS images of lithium ion batteries”; *J. Phys. Commun.* **5**, 115005/1–17 (2021).
- 6) “X-ray study of ferroic octupole order producing anomalous Hall effect”; *Nat. Commun.* **12**, 5582/1–8 (2021).