

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

2022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

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)

岡島 敏浩 ((公財)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(技術・研究開発))

水牧 仁一朗 ((公財)高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤セン
ター 主幹研究員)

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)

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。

広域X線吸収微細構造(EXAFS)の解析では、ベイズ的スパースモデリング解析法を開発してドープメントサイトの推定と、イタリア・カメリーノ大学との国際共同研究の強化によって光電子波の3体散乱過程の組み込みと高速化に取り組んだ。さらに、フルポテンシャル多重散乱法に基づくEXAFSとX線吸収端微細構造(XANES)の統合解析法を開発を進めた。また、ベイズ推定を用いて時分解X線磁気二色性計測データを解析し、強磁性共鳴におけるスピンと軌道の磁気モーメントダイナミクスを分離することに成功した。また、機械学習法による放射光計測の深化として、超伝導転移端検出器の高エネルギー分解能化研究に取り組んだ。

一方、マイクロとマクロのシームレス解析では、リチウム電池モデル電極デバイスと磁性材料の磁区構造解析に取り組んだ。モデル電極デバイスでは、充電過程を捉えた2D-XASデータから充電状態の変化に伴った電子状態の空間的变化をベイズ分光法で高精度評価し、それを理解するため、第一原理計算に基づく活物質の電子状態解析を進めた。さらに、リチウム電池の安定動作性向上には、充電に伴う活物質の劣化現象の定量評価が必須で、2D-XASデータの外れ値に注目して統計的解析を進めた。一方、磁区構造の解析では、パーシステントホモロジー法を適用して磁気異方性と磁場掃引速度の推定に成功した。さらに、強磁性材料の磁区パターンダイナミクスをコヒーレント回折イメージングで捉えることを想定して、高いノイズ耐性が担保できる機械学習法の開発と、ガボール型コヒーレント回折顕微鏡の開発にも取り組んだ。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Bayesian Spectral Deconvolution of X-Ray Absorption Near Edge Structure Discriminating between High- and Low-Energy Domains”, *Journal of the Physical Society of Japan* **91**, 074009/1-9 (2022).
- 2) “Spin-charge coupling and decoupling in perovskite-type iron oxides ($\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x$)_{2/3}La_{1/3}FeO₃”, *Phys. Rev. Materials* **6**, 094401/1-7 (2022).
- 3) “Bayesian Inference on Hamiltonian Selections for Mössbauer Spectroscopy”, *Journal of the Physical Society of Japan* **91**, 104002/1-11 (2022).
- 4) “End-condition for solution small angle X-ray scattering measurements by kernel density estimation”, *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* **2**, 426-434 (2022).
- 5) “Probing Local Environments of Oxygen Vacancies Responsible for Hydration in Sc-doped Barium Zirconates at Elevated Temperatures: In Situ X-ray Absorption Spectroscopy, Thermogravimetry, and Active Learning Ab Initio Replica Exchange Monte Carlo Simulations”, *Chemistry of Materials* **35**, 2289-2301 (2023).