

加藤 健一

理化学研究所放射光科学研究センター
専任研究員

データ駆動型全散乱計測に基づく不均質現象可視化システムの開発と応用

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、ナノ材料内部で生じる、わずかではあるが機能に決定的な影響を及ぼす不均質構造を明らかにすることを目指している。ここでいう不均質とは、ナノ粒子内におけるサブオングストロームスケールでの原子間距離の不均一のことである。このような材料内部の不均質を可視化するには放射光全散乱計測に基づく原子二体分布関数解析が有効である。しかし、現状は計測誤差と解析誤差が可視化を妨げる要因となっている。本年度は主に、昨年度開発した計測誤差低減のための ReLiEf 法をデータ駆動型 ReLiEf法へと高度化し、これまで半日かかっていた補正時間を 30 分に短縮することに成功した。これにより、いつでもどこでも実験条件に合わせて補正することが可能となった。解析誤差に関しては、情報学的アプローチによってフーリエ逆変換に伴う打ち切り誤差をほぼ解消し、結果として実空間分解能の向上に寄与することがわかった。以上のように、ナノ材料を 100 Å 以上の範囲にわたって 0.1 Å の分解能で不均質を可視化する下地が整った。

