

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 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

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

本年度は、これまでに開発した原子二体分布関数 (PDF) に対する情報アプローチの評価と並行して、水素吸蔵金属への応用研究を開始した。PDF は通常、全散乱計測によって見積もられた構造因子をフーリエ変換して得られるが、放射光を利用しても計測範囲は有限であるため打ち切り誤差を伴う。窓関数を使えば打ち切り誤差を低減できるが、実空間分解能の低下は避けられない。本研究では、最大エントロピー原理をもとに計測誤差の範囲内で PDF を推定するアルゴリズムを考案し、その結果の評価を粉末標準試料の Si で行った。この PDF から、窓関数を経ないフーリエ変換と同等以上の実空間分解能を維持したまま、打ち切り誤差を無視できる程度まで小さくできることがわかった。これは定量的に見積もった計測誤差を束縛条件にして最もバイアスが小さくなるよう解を最適化した結果であり、0.1%の精度の PDF が得られるようになり 100 Å を超える距離で定量的な議論ができるようになった。次に、この情報アプローチを代表的な水素吸蔵金属である Pd のナノ粒子に応用した。Pd はサイズに依存して水素吸蔵特性が変化することが知られており、その要因の一つとして結晶粒内部の格子変調があげられる。実験で得られた PDF をもとに格子変調モデリングを行ったところ、水素吸蔵前でもピコメートルレベルの格子変調 (コアシェル構造) が存在することを見出した。さらにそのコアシェル構造が水素吸蔵によって有意に変化することがわかり、結晶粒内部における水素分布の不均一性が示唆された。

【代表的な原著論文情報】

- 1) K. Kato* and K. Shigeta, “On-demand correction for X-ray response non-uniformity in microstrip detectors by a data-driven approach”, *J. Synchrotron Rad.* **27**, 1172-1179 (2020).
- 2) J. Beyer, K. Kato*, and B. B. Iversen*, “Synchrotron total-scattering data applicable to dual-space structural analysis”, *IUCrJ* **8**, 387-394 (2021).
- 3) B. Svane, K. Tolborg, K. Kato*, B. B. Iversen*, “Multipole electron densities and structural parameters from synchrotron powder X-ray diffraction data obtained with a MYTHEN detector system (OHGI)”, *Acta Cryst.* **A77**, 85-95 (2021).
- 4) A. Pinkerton, “Nothing trumps good data”, *Acta Cryst.* **A77**, 83-84 (2021).