


超タイコグラフィによる微視的非平衡状態の可視化プラットフォームの構築

| | | | |
|--|---|---------------------------------|----------------|
|  | 研究代表者 | 東北大学・国際放射光イノベーション・スマート研究センター・教授 | |
| | | 高橋 幸生 (たかはし ゆきお) | 研究者番号:00415217 |
| 研究課題情報 | 課題番号: 23H05403 | 研究期間: 2023年度~2029年度 | |
| | キーワード: 放射光, コヒーレントX線回折イメージング, X線光子相関分光, データ科学 | | |

なぜこの研究を行おうと思ったのか (研究の背景・目的)

● 研究の全体像

身の回りにある実用材料の多くは、ナノメートルからサブミクロンスケールでのドメイン構造を有する不均一・複雑系である。そのドメイン構造の時間変化を追跡し、構造-時間-機能の多次元相関を解析することで、材料機能の発現・劣化機構を真に理解できる。本研究課題では放射光コヒーレントX線を用いたナノ構造可視化技術である「タイコグラフィ」の時間分解能を遙かに凌駕する「超タイコグラフィ」のスキームを実証し、バルク機能性材料の内部に埋もれたナノスケール微細構造・化学状態変化の動画撮像を実現する。そして、不均一な粘弾性を示すタイヤゴム、不均一にイオン輸送する蓄電固体材料など様々な材料系に超タイコグラフィを適用することで、微視的・非平衡状態可視化のためのプラットフォームを3GeV高輝度放射光施設ナノテラスに構築する。

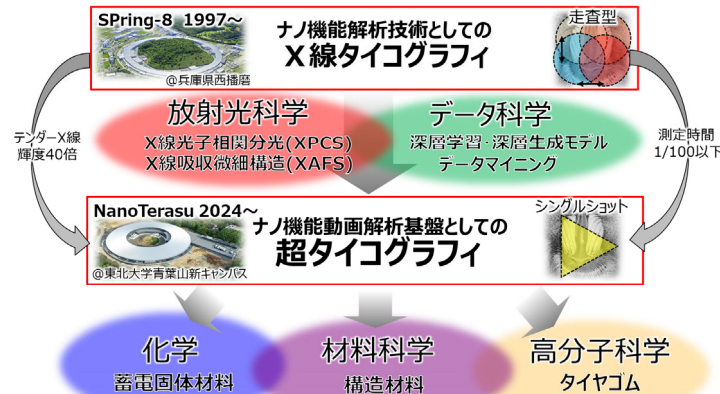


図1 研究全体のイメージ図

● 顕微イメージング法の時空間分解能

ナノ・メソスケール領域での試料のダイナミックな変化を観察する技術として、電子顕微鏡、X線顕微鏡を用いた高速撮像法の開発が進んでおり、それぞれ、sub-ミリ秒、10ミリ秒程度の時間分解能を達成している。しかしながら、電子顕微鏡は数十nm以上の厚みを有する試料観察を苦手とし、X線顕微鏡は、実用的な空間分解能は数十nmに停滞している。一方、レンズレス顕微法であるタイコグラフィは、ナノスケールの空間分解能を実現し、厚みのある試料観察が可能であるものの、時間分解能に乏しく、数分のオーダーである。

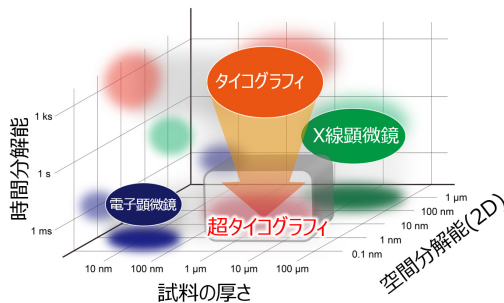


図2 超タイコグラフィで可視化を目指す時空間スケールと電子顕微鏡、X線顕微鏡との関係

● バルクに埋もれたナノ・メソスケールでの非平衡状態

応力印可時のタイヤゴム中のシリカ粒子のナノスケールでの運動およびそれに伴う空間的に不均一な粘弾性は、次世代のエコタイヤの設計に欠かせない情報であるが、これまでは平均構造解析に留まっており、微視的な領域での理解は十分に進んでいない。また、充放電時におけるリチウムイオン電池正極活物質中でのリチウムイオン拡散に伴う二相分離組織の形成過程ならびに相界面の原子スケールでのゆらぎは、新規正極活物質の探索に欠かせない情報であるが未だその詳細は未解明である。また、金属構造材料の時効硬化という冶金学では最も基本的な現象についても、ナノスケールでの析出物形成からメソスケールでの析出物の運動までを実空間で動画化した例はない。

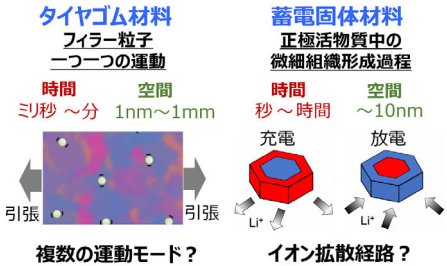


図3 実用材料中の微視的・非平衡状態の例

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

● 超タイコグラフィのスキームの実証と微視的・非平衡状態可視化のプラットフォーム構築

放射光動画撮像法「三角形開口を用いたダイナミックコヒーレント回折イメージング(ダイナミックCDI)」を基軸として「超タイコグラフィ」のスキームを実証し、様々な実用材料の解析に関する応用研究を推進することで、ナノ・メソスケール非平衡状態の可視化のためのプラットフォームを3GeV高輝度放射光施設ナノテラスに構築する。超タイコグラフィのスキームは以下の3つの要素で構成されている。

- ① 動画イメージ取得: ダイナミックCDI計測と深層ニューラルネットワークにより、実用材料の実環境中でのナノスケール微細構造・化学状態変化の動画イメージを取得する。
- ② 時空間スケール拡張: ①で得られた動画の各フレーム画像を中間点として、深層生成モデルと強化学習技術を用いてX線光子相関分光(XPCS)フィッティング解析を連携して行うことで、時空間スケールをそれぞれ0.1秒から1ミリ秒、10nmから1nmまで拡張する。
- ③ メカニズム発掘: ②で得られた広範囲な時空間スケールでの微細構造・化学状態イメージデータに対して、深層学習によるデータマイニングを実行することで、時間・空間・機能パラメータを軸とする多次元空間での相関分布を解析し、材料機能の発現・劣化に関わるメカニズム因子を発掘する。

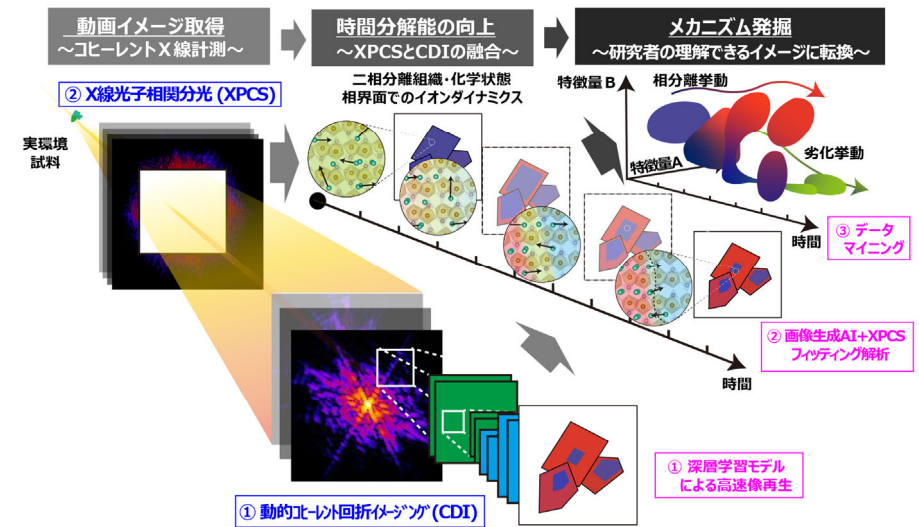


図4 超タイコグラフィのスキームの概念図