

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： データ駆動科学による高次元X線吸収計測の革新

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は評価時点）

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）

主たる共同研究者

青西 亨（東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授）

山崎 裕一（物質・材料研究機構マテリアル基盤研究センター 主幹研究員）

岡島 敏浩（（公財）科学技術交流財団あいちシンクロトン光センター 副所長）

水牧 仁一朗（熊本大学大学院先端科学研究部 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A 優れている

○総合評価コメント：

本研究課題では、機能性材料において、そのミクロ物性、メゾ構造、マクロ機能の発現までをシームレスに解明する方法論を開発することを目指した。具体的には、放射光を用いた X 線吸収微細構造 (XAFS) スペクトル、X 線磁気二色性 (XMCD) スペクトルとその顕微計測データから、物性特徴量を抽出する段階とメゾ構造を解析する段階でデータ駆動科学を融合し、高性能磁石材料と二次電池の固体電解質材料の先端研究に応用することを目指した。基礎研究としては、X 線吸収スペクトルのベイズ分光法解析、磁気ドメインのデータ駆動型解析、異種計測情報のベイズ統合、に関して優れた成果を上げた。特に、異種計測情報のベイズ統合においては、X 線吸収分光 (XAS)、X 線光電子分光 (XPS)、X 線発光分光 (XES) のデータを統合して、それらを説明するハミルトニアンとそれに含まれる物理パラメータを高精度に推定できることを示したことは高く評価できる。

科学技術イノベーションに寄与する成果としては、スペクトル情報を含む高次元画像データの解析法、広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS) のスパースモデリングが挙げられる。後者は、S/N 比の低い EXAFS データから原子間距離や配位構造を推定できることを示しており、このことは高い評価に値する。

二次電池への応用としては、充電過程のデータ駆動解析を行い、充電中のデバイス内の活物質への充電電流、電位、充電方向の伝導度のデバイス内伝播の時間空間ダイナミクスの理解に資する情報を得ることに成功している。リチウム電池の劣化現象については、そのダイナミクスを 2D-XAS データからの統計解析により明らかにし、開発に向けての基礎データが得られた。ニューラルネットとマルコフ確率場を組み合わせた新しい手法で、ダイナミクスの解析が進んだ点が高く評価できる。特に、静的状態から動的状態の解析ができ、より精密な電池特性の理解につながるものとして評価できる。現在の空間分解能は数ミクロンレベルであり、今後は、実際の微細構造の解析レベルに向けてさらなる分解能の向上を期待する。また、当初の提案を超える磁性材料などの研究テーマにも優れたリーダーシップを発揮した。さらに、イタリア・カメリーノ大学との国際共同研究にも積極的に取り組んだ。リチウム電池あるいは代替材料を用いる電池開発は、当該産業分野でもホットな課題である。産業界との今後の積極的な連携が期待される。