

# PF での XAFS 高度化、マルチスケール顕微鏡、データ集積・解析

木村正雄

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所

物質構造科学研究所の特色を活かした材料科学分野の研究を進めるために、材料科学研究部門では放射光実験施設の関連部門の協力を得て、以下の3つの分野を中心に、計測手法の高度化とそれを用いた材料研究を進めている。

- (1) 顕微分光を用いた機能発現/劣化の起点および時間のメカニズム解明
- (2) 時分割計測を用いた不可逆反応/人工光合成のメカニズム解明
- (3) ナノ粒子/ナノ表面計測を用いた触媒/エネルギー材料の反応メカニズム解明

(1)の顕微分光については、SIP 国プロ「革新的構造材料」や新学術・水惑星の創成等のプロジェクトや機構強化予算を活用して、硬軟 X 線による multi-scale (time&space), multi-dimension, multi-modal の様々な X 線顕微鏡を整備して研究に活用している[1-3] (図 1)。今後は、材料サイドの研究グループと協力して、複数の手法の併用やその場観察の開発等を進めていく。

(2)の時分割計測については、PF-AR や PF ハイブリッドモードでの孤立バンチの時間構造を活用した pump-probe 的な手法に加え、PF でのマルチバンチを活用した indexing 手法の開発等も進め、これまで比較的空白となっていた ns オーダーでの時間領域のメカニズム解明、不可逆反応の解明を進めて行く[4,5]。

(3)のナノ粒子/ナノ表面計測については、表面の反応を全反射 XAFS で計測する手法(TREXS)の開発と応用を進めている[6]。また様々な環境での multi-modal 計測として、1500°Cの高温での XAFS/XRD の同視野計測の技術[7]を開発し材料研究に展開している。

こうした multi-scale, multi-dimension, multi-modal の計測を進めると、得られるデータサイズは膨大となり、そのデータの扱いや解析のためのプラットフォームが重要となる。オープンリソースを活用してそうした整備を進める一方、情報科学[8]や応用数学[9]を用いたデータ処理についての検討も進めている。

こうしたグループでの取り組みの個々の研究内容についてはポスター発表にて詳細に報告する。研究会ではこうした状況を踏まえて、これからの研究の進め方について議論したい。

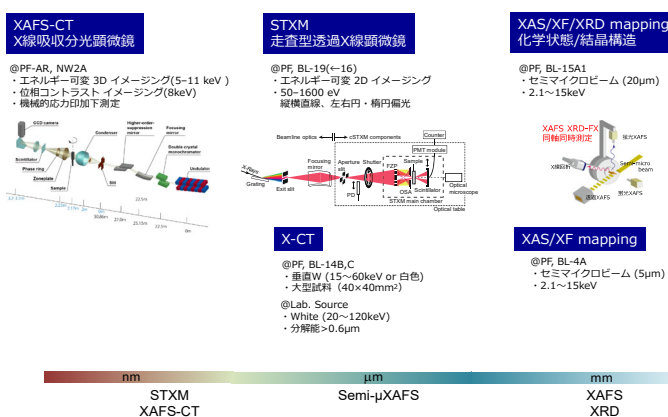


図 1 物質構造科学研究所の主な X 線顕微鏡(上)とカバーする領域(下)

- [1] Y. Takeichi *et al*, *Microscopy and Microanalysis* **24**, 484 (2018).
- [2] T. Watanabe *et al*, *Microscopy and Microanalysis* **24**, 432 (2018).
- [3] Y. Niwa *et al*, *AIP Conf. Procds* **2054**, 050003 (2019), M. Kimura *et al.*, *Chem. Rec.* **19**, 1 (2019).
- [4] T. Sato *et al*, *The Journal of Physical Chemistry C* **116**, 14232 (2012).
- [5] Y. Niwa *et al*, *High Pressure Research* **36**, 471 (2016).
- [6] H. Abe *et al*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **55**(2016), H. Abe *et al*, *Chem. Rec.* **19**, 1457 (2019).
- [7] K. Kimijima *et al*, *Radiation Physics and Chemistry*(2019).
- [8] Y. Suzuki *et al*, *npj Computational Materials* **5**(2019).
- [9] M. Kimura *et al*, *Scientific Reports* **8**, 3553 (2018).