

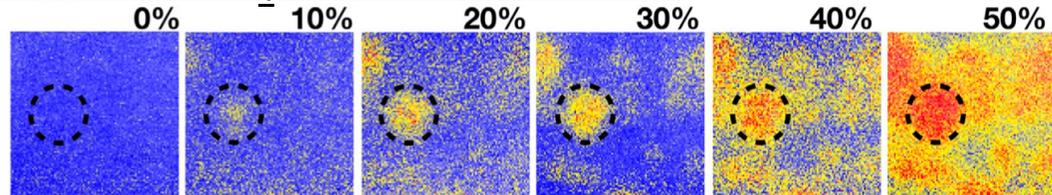
新BL-11での2ビーム利用サイエンスケース

X線吸収分光（硬X線XAFS）

新BL-11での2ビーム (SX+HX) 利用提案 (不均一・その場観察)

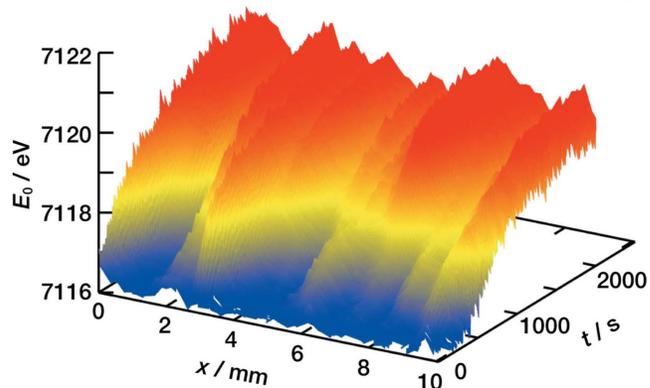
材料の機能発現を動作環境下で観察する = 不均一に生じる反応部位の観察

充電中のLiFePO₄カソードの鉄の化学状態



○機能発現している材料の中にも働かない部位が多く存在
○場所によって反応の進行の仕方が異なる

➡ 反応が時空間に不均一に進行



空間的、時間的に不均一に生じる反応を
同一位置、同一時間で計測

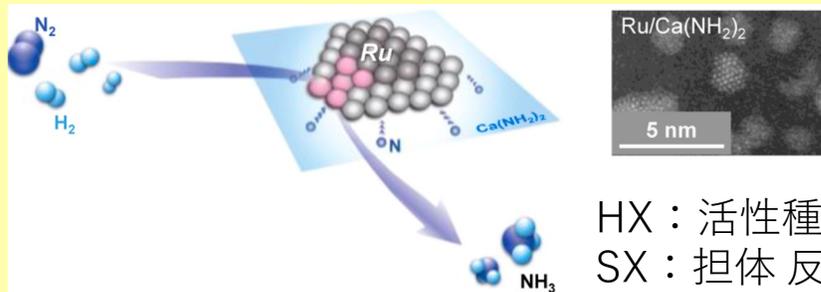


時空間の反応の起点・経路を見出すことが可能

M. Katayama, et al., *Journal of Power Sources*, **269**, 994 (2014).
M. Katayama, et al., *Journal of Synchrotron Radiation*, **22**, 1227 (2015).

複数の反応物を同時に見る

ex. 不均一触媒反応メカニズム

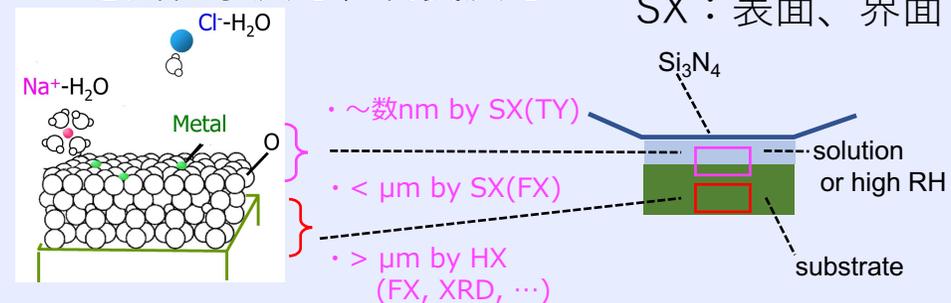


HX: 活性種
SX: 担体 反応ガス、生成ガス

同一エリアの異なる反応部位を同時に見る

ex. 電気化学反応、腐食反応

HX: バルク情報
SX: 表面、界面



新BL-11での2ビーム (SX+HX) 利用提案 (不均一・その場観察)

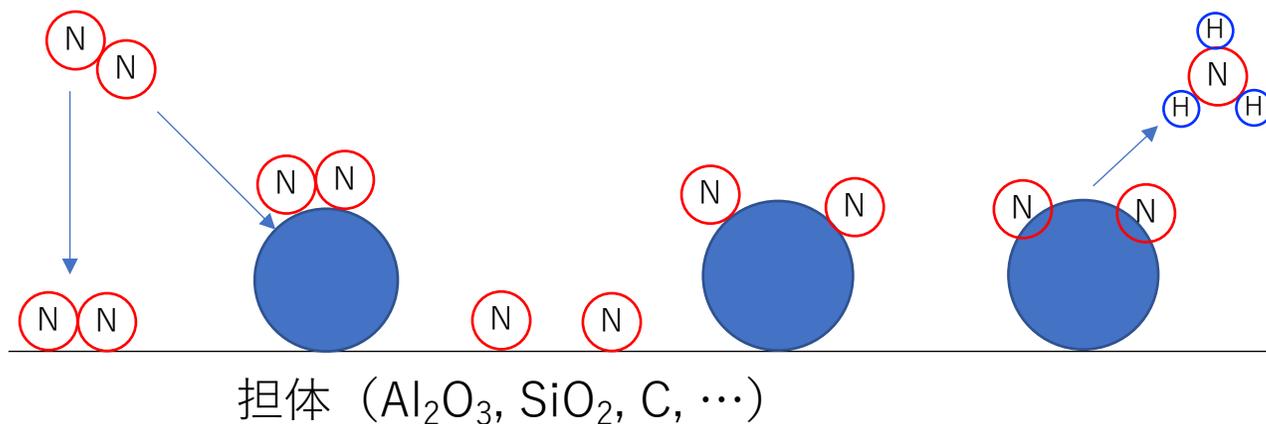
材料の機能発現を動作環境下で観察する

複数の反応物を同時に見る

ex. 不均一触媒反応メカニズム

HX: 活性種 (遷移金属)

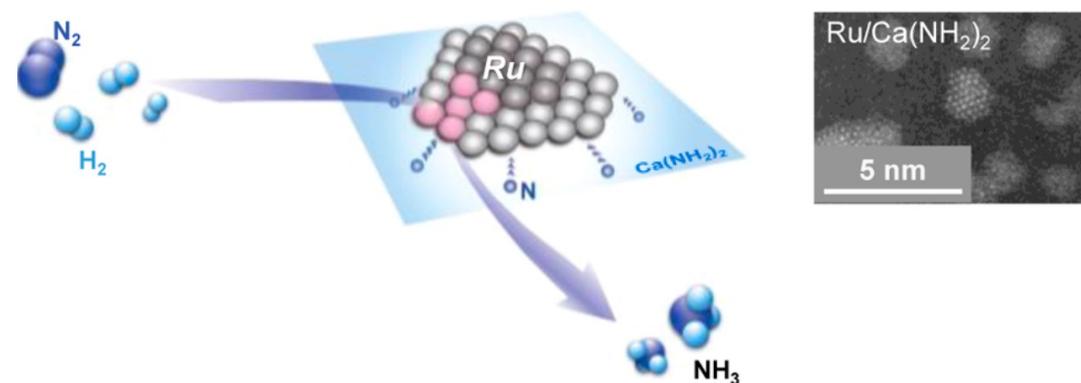
SX: 反応ガス、生成ガス (N_2 , CO , CH_3 , O_2 など)



空間的、時間的に不均一に生じる反応を
同一位置、同一時間で計測



時空間の反応の起点・経路を見出す



動作環境下において...

HX 担体上の触媒活性種をXAFS計測し、化学状態、構造変化を捉える。

SX 反応ガス、生成ガスもしくは担体のXAFS、XPSを同時計測し、ガスの吸着、解離、反応を追跡する。

必要な技術

- ・ 時間分解計測 (ms~min) → DCMとGratingの同調動作
- ・ 低真空での触媒反応in situセル ($T < 900^\circ C$)

SXビームラインで既に実績のある系にHXの実験を足すイメージ

新BL-11での2ビーム (SX+HX) 利用提案 (不均一・その場観察)

材料の機能発現を動作環境下で観察する

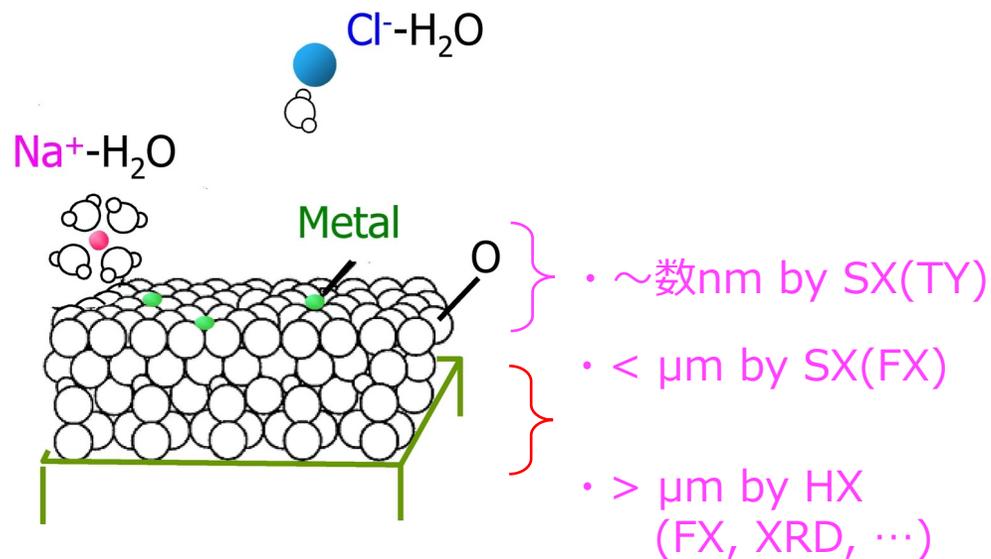
同一エリアの異なる反応部位を同時に見る

ex. 電気化学反応、電極反応、腐食反応

空間的、時間的に不均一に生じる反応を
同一位置、同一時間で計測



時空間の反応の起点・経路を見出す



動作環境下において…

SX、HXの侵入深さの違いを利用して

(水)溶液/固体の固液反応系の界面反応を観察

・例えば、電極反応、腐食反応、岩石/水反応

反応の trigger 後の、拡散による反応観察

(時間>sec.) の観察が現実的

・ trigger は電気化学ポテンシャル、温度、stopped and flow等

新BL-11での2ビーム (SX+HX) 利用提案 (不均一・その場観察)

材料の機能発現を動作環境下で観察する = 不均一に生じる反応部位の観察

材料の動作環境下でSX、HXを同時に用いることで…

時空間に不均一な系

異なる「タイミング」で「平均」して測定する方法では、
反応や劣化の起点 ("trigger sites") を決めることができない



これからの社会イノベーションで求められる
プロセス・インフォマティクスに不可欠



空間的、時間的に不均一に生じる反応を**同一位置**、**同一時間**で計測

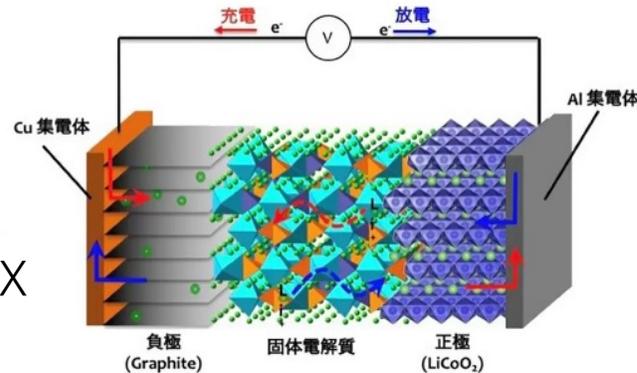


時空間の反応の起点・経路=時空間の階層構造を見出すことが可能

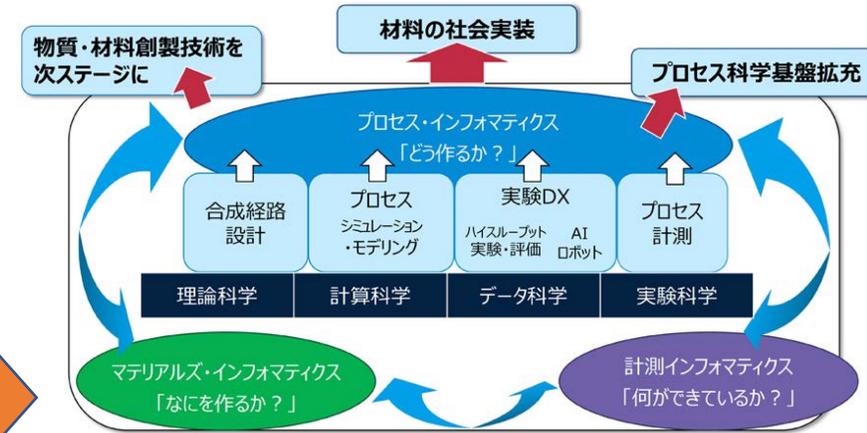
全固体電池

電解質: S (硫黄) ← SX

電極: Co (cobalt) ← HX



<https://www.toyo.co.jp/solution/car/column/detail/id=15675>



社会課題解決を志向した計測・解析プロセスの革新【JST】資料より抜粋
JST戦略プロポーザル 材料創製技術を革新するプロセス科学基盤より抜粋