

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

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）

3. 事後評価結果

本研究は、局所構造解析ツールとして認識されてきた放射光全散乱(ブラッグ反射+散漫散乱)計測に基づく原子二体分布関数(Atomic Pair Distribution Function:PDF)解析法を、「個々の平均像」を原子スケールで明らかにする不均質現象可視化システムへ転換し、「真」の全散乱 PDF 法を実現することを目的として行われた。

統計アプローチと情報アプローチを融合することによって実現したデータ駆動型全散乱計測により、最大 500 Å の範囲を 0.1 Å の分解能で議論できる原子二体分布関数 (PDF) が得られるようになった。このような PDF からナノ結晶粒内の格子歪み分布の情報を引き出すために、新たに定義した格子変調関数を軸とする不均質現象可視化システムを構築した。このシステムを水素吸蔵金属である Pd のナノ結晶に応用した結果、水素吸蔵前でも粒径によって歪み分布に大きな差があることがわかった。いずれも水素吸蔵によって歪み分布の偏りが緩和される方向に変化し、特にサイズ効果が顕著な 10 nm 以下では大きな緩和を示すことも明らかにした。

独自の計測技術である OHGI の性能を最大限高める情報手法 ReLiEf 法の開発は、本情報計測分野の最大の成果の一つである。一連の研究は完成度が高く、計測と情報の融合により従来の限界を突破し、それを実材料の分析において実証するという、本領域の趣旨を実践したモデルケースと言える。

本課題は、さきがけならではの論文が多数出ていることも高く評価できる。開発された全散乱計測システム OHGI や X 線検出器の感度ムラの補正法 ReLiEf は、SPring-8 BL44B2 においてユーザー利用も開始されており、また、海外の放射光施設への導入も検討されている。社会的にも重要なものであり、今後より広く活用するための取り組みを期待する。