

X線解析における数理とデータベース利用

Keywords: モデルフリー解析、客観解析、高速解析、計測インフォマティクス

材料データプラットフォームセンター 材料データベースグループ

石井 真史

ISHII.Masashi@nims.go.jp | <http://www.nims.go.jp/research/group/materials-database.html>



研究の背景

- X線による構造解析の歴史は長いですが、結果の可視化・定量化は容易ではなく、直観性に欠ける
- X線の波長は原子の大きさに近く、原子レベルの物理を取り込んだ仮定やモデルが必要
- 解析者はデータ処理に膨大な時間をかけるが、多くの場合、客観性に乏しい
- コンピュータの進歩により、情報数理や大量データを活用できる時代へ突入

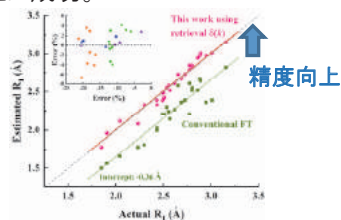
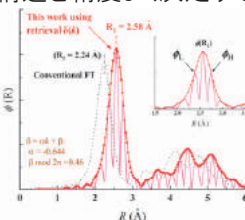
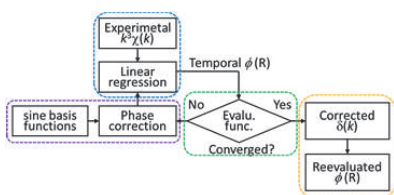
研究の狙い

- 構造仮定モデルを使わないX線吸収微細構造 (XAFS) 解析法の開発
- データベースで長年収集したデータを使った、X線回折 (XRD) パターンの高速・客観解析法の提案
- 繰り返し測定の中から、本質的な量 (特徴量) を引き出すロバスト解析の試行
- ビッグデータを有効利用し、情報数理を駆使する「計測インフォマティクス」の展開

最先端研究トピックス

X線微細構造 (XAFS) 解析における計測インフォマティクス:

従来のXAFSでは必要であった仮定構造モデルを使わない、純粋に数理的なアルゴリズム (自己無頓着位相回復) で原子レベルの局所構造を精度よく決定することに成功。



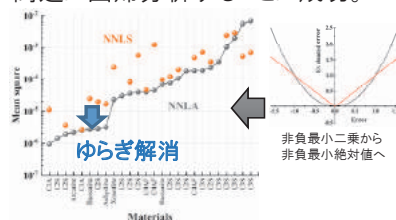
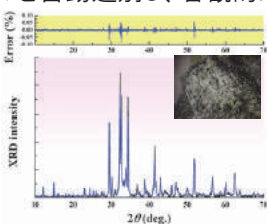
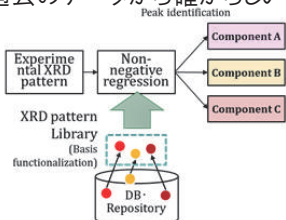
自己無頓着位相回復アルゴリズム

モデルフリー解析の例

元素・化学結合によらず高精度

X線回折 (XRD) 解析における計測インフォマティクス:

従来のXRDでは、混合結晶の解析は勘と経験と長い時間を要する。データベースに収録された過去のデータから確からしいものを自動選別し、客観的かつ高速に回帰分析することに成功。



XRD非負線形回帰アルゴリズム

微小成分まで瞬間・客観解析

ロバスト解析で繰り返し測定ゆらぎを解決

文献

- ・ M. Ishii, OYO BUTURI, Vol. 85, p.p. 223-227 (2016).
- ・ M. Ishii, The 17th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure, 22-27 July 2018, Kraków, Poland.

応用分野と今後の展開

- XAFS: 未知材料のモデルフリー局所構造解析
- XRD: 未知の混合結晶の客観・高速分析
- 他の分析法への展開
- NIMSデータベースと計測装置の結合「ラボに直結したDB」の実現

実用化へ向けた課題

- 解析ソフトウェアの操作性の向上、UIの整備
- データベースから情報を効率的に検索抽出・クレンジングする技術の開発
- データベースと大量のデータ交換を行う装置作り
- 装置メーカー・ソフトメーカーの協力