

X線顕微鏡による化学状態マッピングと応用数学による 材料学的知見無しでの反応サイト特定

高エネルギー加速器研究機構(KEK)・物質構造科学研究所(IMSS) 木村正雄 武市泰男
 理研革新知能統合研究センター 大林一平
 新日鐵住金先端技術研究所 村尾玲子 京都大学高等研究院 平岡裕章

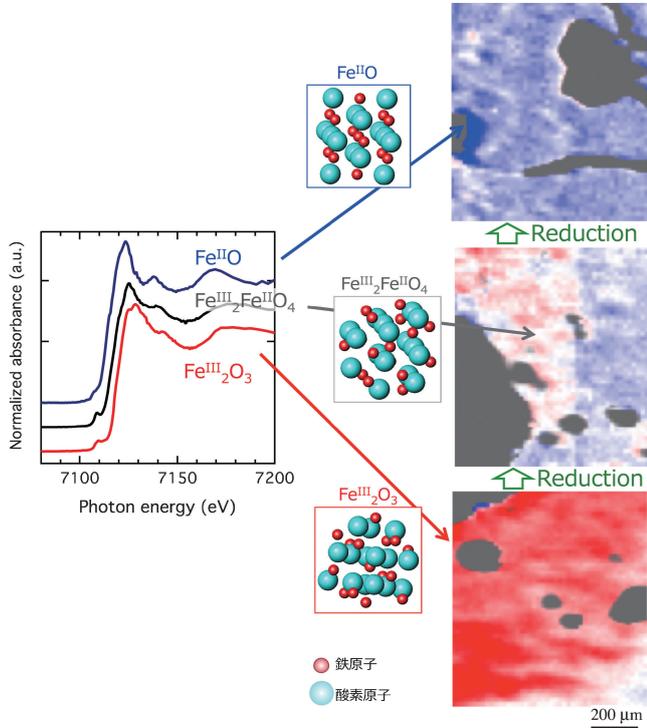


Fig. 1 還元度合いの異なる焼結試料について鉄の化学状態をマッピングした結果(右). 区別は吸収スペクトル(左)によるもので、僅かな電子状態の差異も反映されている。

X線顕微鏡を用いると材料組織と構成原子の化学状態の両方が可視化できる。但し測定データは空間+エネルギーの多次元ビッグデータとなる。内在する情報を最大限に引き出すために、人間の経験に頼らない新たなアプローチ(計測+応用数学)に取り組んだ。

Fig. 1は、還元度合いの異なる焼結鉄試料について、放射光のX線吸収分光(XAS)を用いて鉄の化学状態(Fe^{II}, Fe^{II}+Fe^{III}, Fe^{III})をマッピングした結果である⁽¹⁾。還元が不均一・複雑に進行していることが明瞭に可視化されている。

焼結鉄を還元するとクラック等の発生のために機械的強度が低下する。試料全体の特性劣化の起点となる化学状態の不均一組織を、応用数学(persistent homology)と機械学習により解析・特定することに成功した⁽²⁾⁽³⁾。“島型”、“砂時計型”の組織が、還元に伴うき裂発生起点であることが、何の予備情報無しに特定できた(Fig. 2(a))。これらのサイト付近で実際にクラックが発生していることが確認され(Fig. 2(b))、本アプローチの有用性が確認された。本アプローチは、組織形状がマクロ特性に関する様々な現象への展開が期待できる。

文 献

- (1) M. Kimura, Y. Takeichi, R. Murao, I. Obayashi, Y. Hiraoka and Y. Liu: J. of Phys.: Conference Series, **849** (2017), 012015.
- (2) M. Kimura, I. Obayashi, Y. Takeichi, R. Murao and Y. Hiraoka: Sci. Rep., **8** (2018), 3553.
- (3) I. Obayashi, Y. Hiraoka and M. Kimura: J. of Applied and Computational Topology, **1** (2018), 421.
 (2018年8月29日受理) [doi:10.2320/materia.57.595]

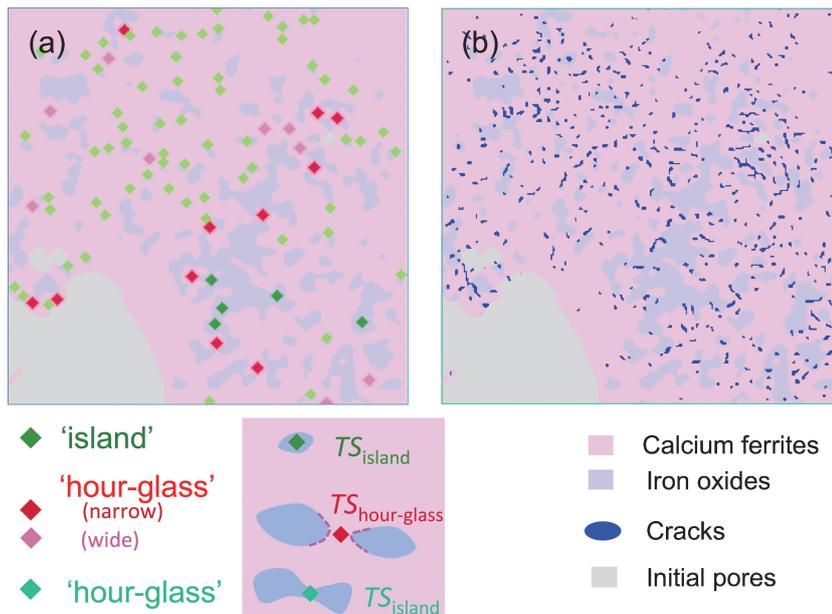


Fig. 2 (a) 応用数学(persistent homology)と機械学習により解析・特定された特性劣化の起点。“島型”、“砂時計型”の合計4種類の形状のき裂発生起点(Trigger Site)が特定された。(b)実際に発生したクラック(X-CTの観察結果)。(注)(a)の四種の劣化起点は試料全体の特性(スカラー量)を低下させる因子解析の結果明らかになったもので、(b)の情報を全く使っていない(例えば(b)との相関から求めたりする従来の方法とは考え方が全く違う)。

Chemical State Mapping Using X-ray Microscopes and Non-empirical Analysis of Trigger Sites Using Applied Mathematics; Masao Kimura, Ippei. Obayashi, Yasuo Takeichi, Reiko Murao and Yasuaki Hiraoka
 Keywords: X-ray microscopy, X-ray absorption, persistent homology
 Observation: X-ray microscope using synchrotron radiation (KEK/IMSS/PF BL-15A1, E = 7080–7100 eV), Sample preparation: mechanical polished, Analysis: persistent homology and machine learning