

# オペランドXAFS分光イメージングにおける データ科学の必要性と期待

名古屋大学 物質科学国際研究センター  
大学院理学研究科物質理学専攻(化学系)  
国際高等研究機構

唯 美津木



# グリーン成長戦略（概要）

（令和3年6月18日策定）

- 温暖化への対応を、経済成長の制約やコストとする時代は終わり、「成長の機会」と捉える時代に入っている。
- 実際に、研究開発方針や経営方針の転換など、「ゲームチェンジ」が始まっている。この流れを加速すべく、グリーン成長戦略を推進する。
- 「イノベーション」を実現し、革新的技術を「社会実装」する。これを通じ、2050年カーボンニュートラルだけでなく、CO<sub>2</sub>排出削減にとどまらない「国民生活のメリット」も実現する。

## 2050年に向けて成長が期待される、14の重点分野を選定。

・ 高い目標を掲げ、技術のフェーズに応じて、実行計画を着実に実施し、国際競争力を強化。 ・ 2050年の経済効果は約290兆円、雇用効果は約1,800万人と試算。



### SPRING-8/SACLARとグリーンイノベーション

大型放射光施設SPRING-8とX線自由電子レーザー施設SACLARでは、グリーン成長戦略に貢献した様々な研究開発が進められている。産官学での一層の活用を進めるために「グリーンファシリティー」であることを、宣言する。



#### グリーンファシリティー宣言

大型放射光施設「SPRING-8」とX線自由電子レーザー施設「SACLAR」は持続可能な開発目標（SDGs）の、2050年カーボンニュートラル達成に向けた産官学の研究開発活動の、総力を結集して強力に支援してまいります。合わせて、施設自体も一層の省エネルギー化に向けた努力を進めてまいります。引き続き、皆様方の御のご活用とご支援を賜りますよう、お願い申し上げます。

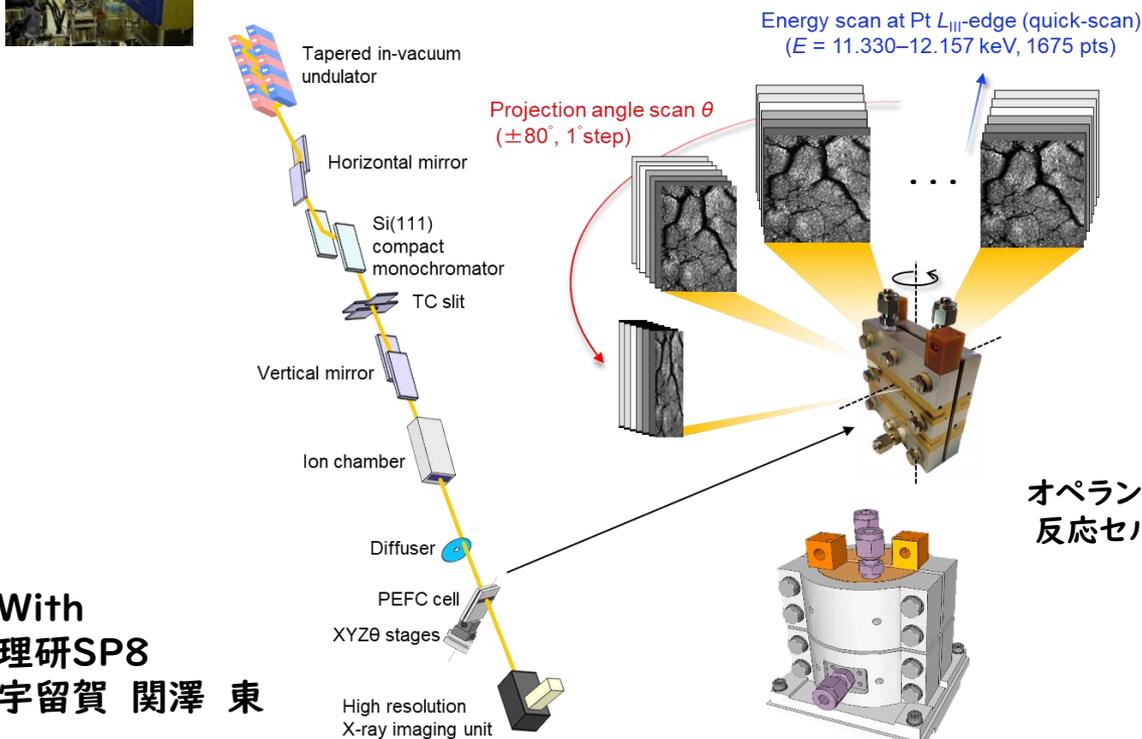
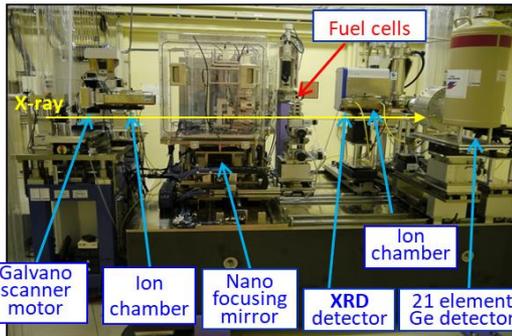
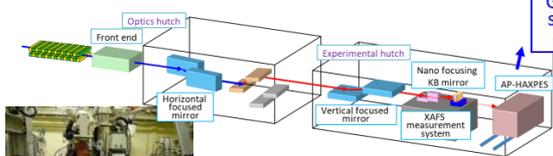
### オペランド計測と連携した研究開発

- 各要素の研究開発
- 要素が多岐にわたり、それらの複合システムを扱う必要性と難しさ

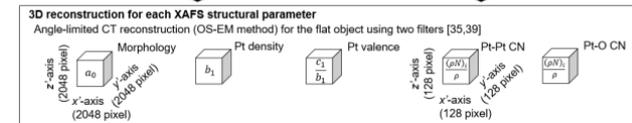
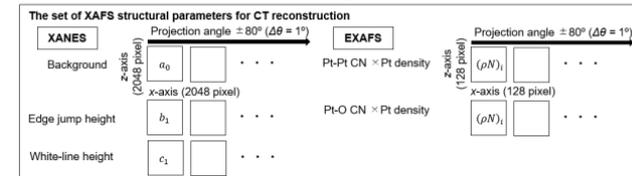
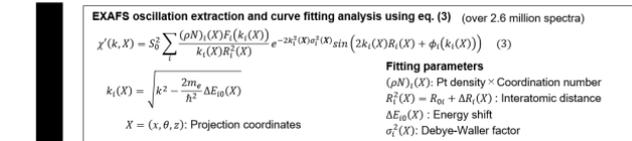
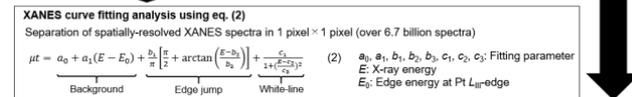
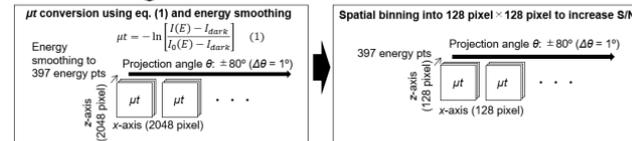
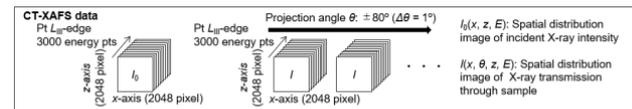
### 非破壊診断・オペランド評価技術の革新

## オペランド X線分光イメージング計測

Chem. Rec. 19, 1444-1456 (2019). etc.  
@ SPring-8, RIKEN



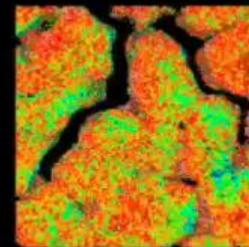
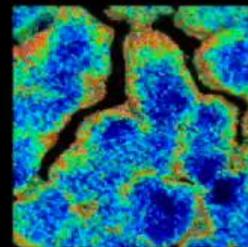
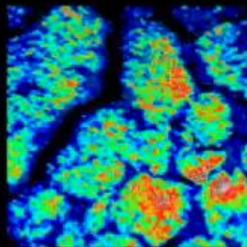
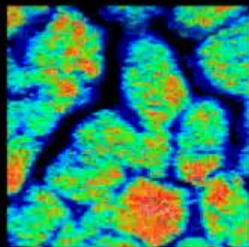
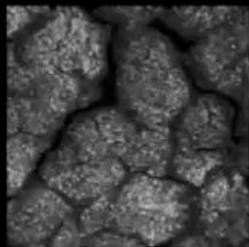
オペランド  
反応セル



イメージングXAFS  
解析法

Angew. Chem. Int. Ed. 56, 9371-9375 (2017).  
J. Phys. Chem. C 123, 18844-18853 (2019).  
Chem. Rec. 19, 1380-1392 (2019).  
Chem. Rec. 19, 1444-1456 (2019).  
Commun. Chem. 2, 50 (2019). 等

## 燃料電池セル運転中の膜内の **生きた** 触媒の **生身の姿**



運転  
ADT

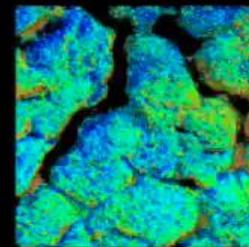
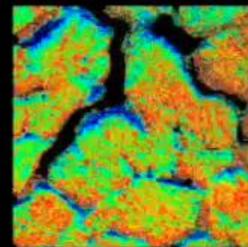
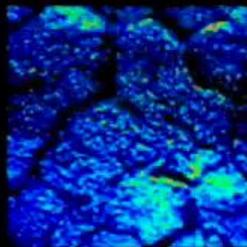
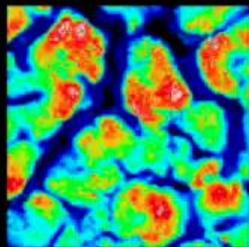
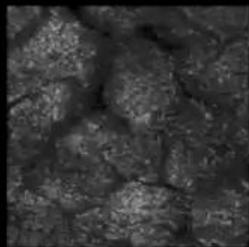
モルフォロジー

白金の分布

コバルトの分布

白金の酸化数分布

セル電位に対する  
白金の酸化応答分布



深さ方向

100 μm

構造の空間情報

活性の空間情報

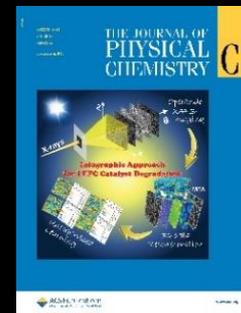
空間分解能  
1.3x1.3x1.3 μm<sup>3</sup>

リアルな機能性物質の  
反応像に直接挑める

1画像: 1860万点のデータ

世界初

*J. Phys. Chem. C* 123, 18844-18853 (2019).  
(selected as supplementary cover of journal)

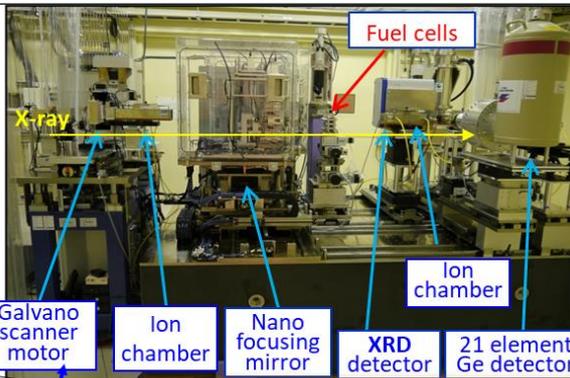




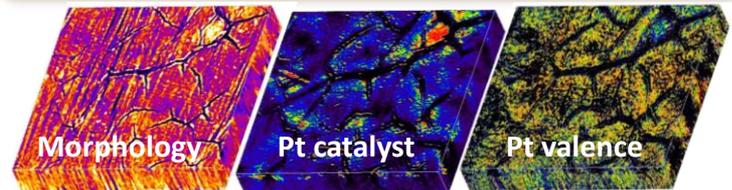
# 固体高分子形燃料電池内の様々な現象を可視化

## Developments of Operando X-ray Imaging

T. Uruga, O. Sekizawa et al,  
*J. Phys.: Conf. Ser.* **849**, 012022 (2017).  
*Chem. Rec.* **19**, 1444-1456 (2019). etc.  
 @ SPring-8, RIKEN

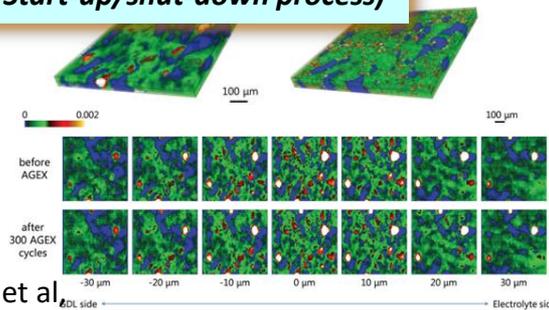


## Operando 3D CT-XAFS Imaging of PEFC



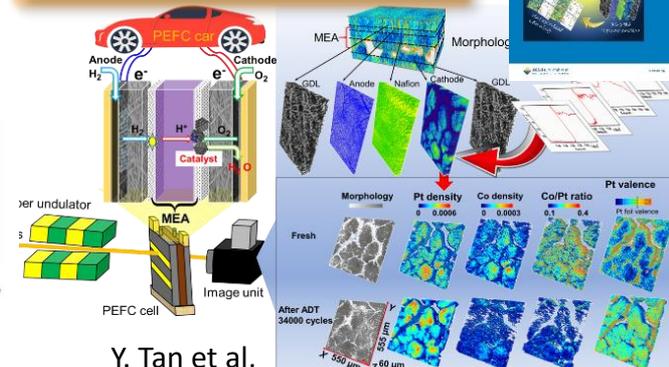
H. Matsui et al, *Angew. Chem. Int. Ed.* **56**, 9371 (2017).

## Anode-gas Exchange (Start-up/shut-down process)



K. Higashi et al,  
*Microsc. Microanal.* **24**, 442 (2018).  
*Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 18919-18931 (2020).

## 3D Imaging of Cathode Catalyst Degradation

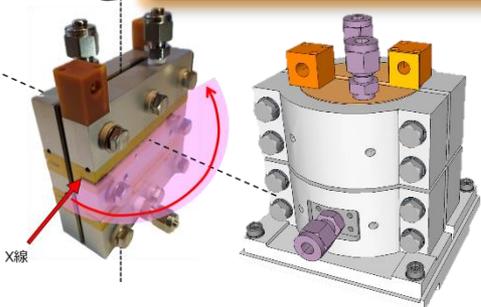


Y. Tan et al,  
*J. Phys. Chem. C* **123**, 18844-18853 (2019).

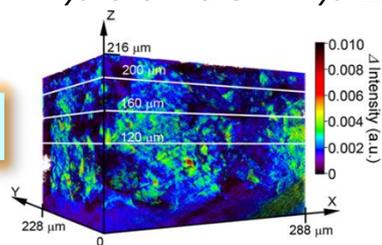


H. Matsui et al,  
*Chem. Rec.* **19**, 1380-1392 (2019).

## Preparation of PEFC Cells for Operando Imaging

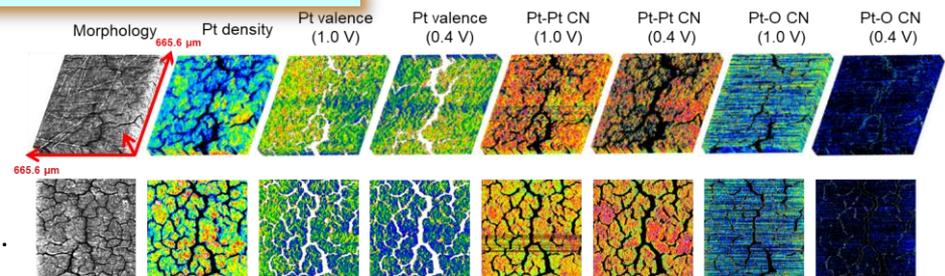


## X-ray Laminography Imaging



*Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 10331-10314 (2012).  
*Catal. Lett.* **145**, 58-70 (2015).

## Operando 3D Local Coordination Maps



# オペランドイメージングにおけるデータ技術の必要性

One 3D image: 19,575,876 data set (x, y, z)

オペランド可視化イメージング  
1つの試料、一度の測定 →  
膨大な構造・状態データを  
実測値として提供

イメージングデータの高速解析

Fresh	ADT 21000 cycles	ADT 34000 cycles
morphology	morphology	morphology
Pt density	Pt density	Pt density
Co density	Co density	Co density
Co/Pt ratio	Co/Pt ratio	Co/Pt ratio
Pt valence at 1.0 V	Pt valence at 1.0 V	Pt valence at 1.0 V
Pt valence at 0.4 V	Pt valence at 0.4 V	Pt valence at 0.4 V

coordinates (x, y, z) ↔

可視化ビッグデータの認知

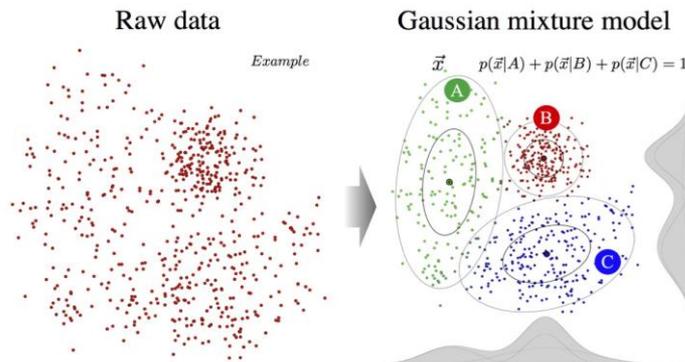
$\Delta$ morphology $\Delta$ Pt density $\Delta$ Co density $\Delta$ Co/Pt ratio $\Delta$ Pt valence at 1.0 V $\Delta$ Pt valence at 0.4 V	$\Delta$ morphology : C corrosion $\Delta$ Pt density : Pt dissolution, aggregation $\Delta$ Co density : Co dissolution $\Delta$ Co/Pt ratio $\Delta$ Pt valence at 1.0 V $\Delta$ Pt valence at 0.4 V
---	--

## Clustering of descriptors $\rho(x, y, z)$

The mixture of Gaussian models.

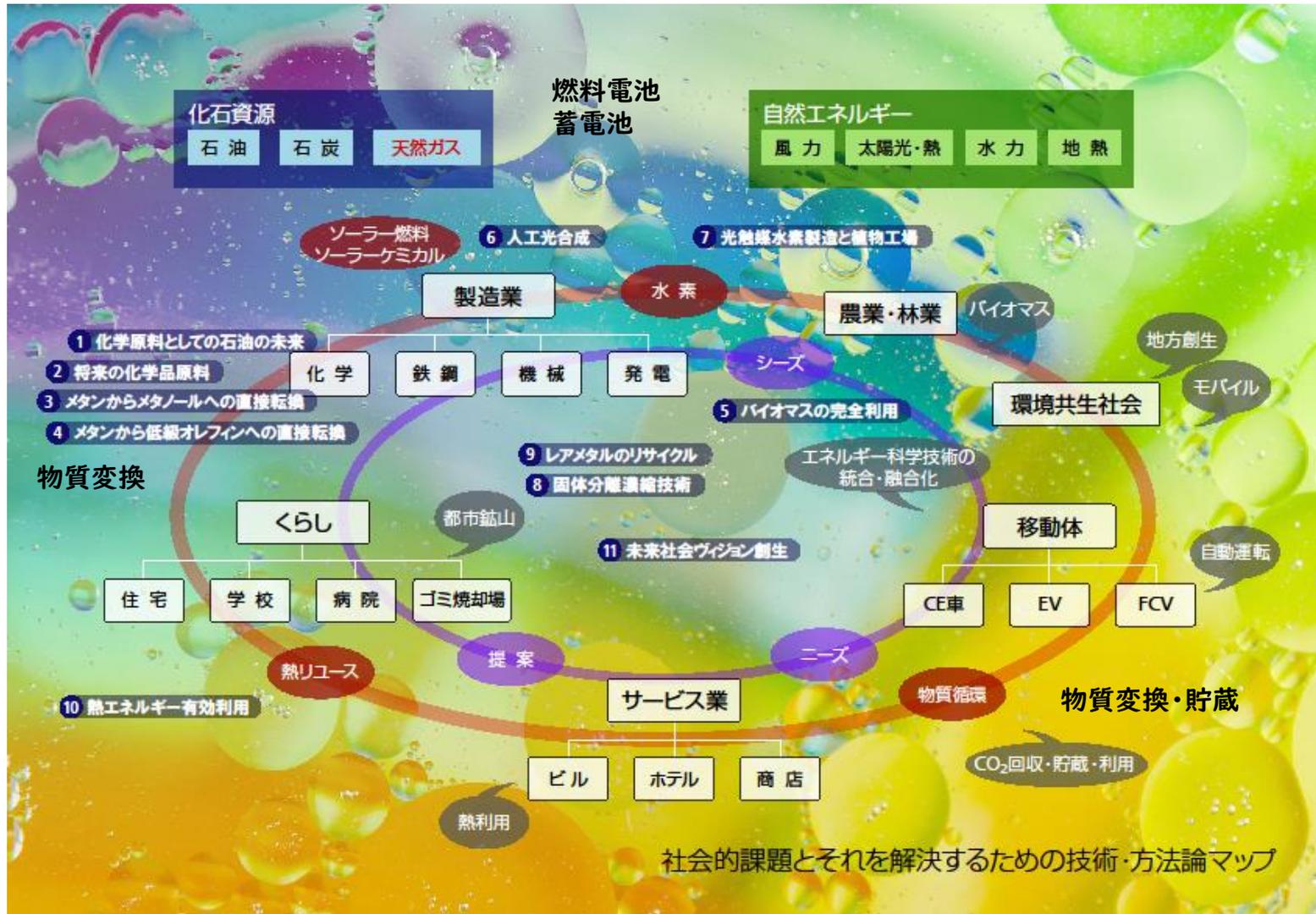
$$p(\mathbf{x}_i | \theta) = \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k),$$

$\pi$ : weights,  $\mu$ : center,  $\Sigma$ : coefficients matrices of 2D Gaussians



With  
Prof. Dam  
(JAIST)

# 学際的研究基盤とカーボンニュートラルへの貢献



機能性の因子解明 (機能向上、新原理、元素戦略等)  
新物質変換材料・反応開拓 (カーボンニュートラル)  
デバイス・実材料の運転時の課題解明 (原理、耐久性、設計因子)

日本学術会議 触媒化学・化学工学分科会資料 より

## ① イメージング計測の高度化と発展による従来の**研究スタイルの变革**

測定して、データを持ち帰って、後から解析 → その場で解析して、すぐに使う  
ネットワーク基盤を利用して、リアルタイムで異分野研究者が討議  
(放射光計測の研究者(計測専門)と物質開発の研究者(物質専門)が  
リアルタイムで議論して、物質側が知りたい情報・条件等を測定中にフィードバック。  
オペランド計測では重要。)

## ② 測定現場での高速解析とイメージングビッグデータの**解析速度の向上**

物質開発サイドは、迅速診断できないと、開発速度と釣り合わない。  
測定してすぐにラフな解析ができる + 戻ってから詳細解析(いずれも高速化)

## ③ 最先端の可視化計測による、**これまで手に入らなかった物質ビッグデータの提供と活用**

データベースに依存するマテリアルズインフォマティクスの高度化?  
実験科学者とデータ科学者のシームレスな連携  
データを生み出すことのできるSPring-8の強さを生かすデータセンター