

2019年9月4日

SPring-8データ科学研究会（第7回）／第43回SPring-8先端利用技術ワークショップ

兵庫県マテリアルズ・インフォマティクス講演会（第3回）「放射光計測インフォマティクス」

材料科学とデータ科学を融合した 新しい解析手法の開発

東京理科大学 基礎工学部材料工学科 准教授
東京理科大学 マテリアルズインフォマティクス懇談会 代表
MI²I トポロジカル解析Gr 特別研究員

小嗣真人

小 嗣 研 究 室

電 子 物 性 材 料 工 学

私たちは、グリーンエネルギー社会の実現に向けて、**ありふれた元素で高機能な材料研究**を行っています。電気自動車、次世代磁性材料、超高速メモリ、隕石等、物性の根源である「**電子スピン**」を巧みに操り、新しい機能材料を創っていきます。

Our Targets



次世代電気自動車



レアメタルフリー磁性材料



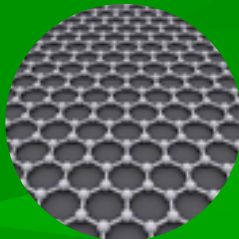
高効率モーター



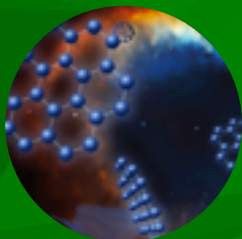
鉄隕石



次世代メモリ



グラフェン



地球惑星科学



電子状態

Our Strategy

Materials Fabrication

分子線エピタキシーやスパッタ法を活用し、原子層レベルの構造制御を行いながら、新規材料の創製を行います。さらにはフォトリソグラフィーを活用し、微細構造の作り込みを行います。ラピッドプロトタイピングの思想で、ナノ構造を巧みに作成していきます。

Advanced Analysis

大型放射光施設SPring-8を活用し、物質機能の根源である電子状態や結晶構造を世界最高の分解能で直接可視化します。さらにはX線自由電子レーザーSACLAにも展開し、超高速現象の謎に迫ります。

Data Science

近年発展の著しいデータサイエンスを材料科学に適用し、高速かつ高度な材料解析や材料創製を行うための方法論を開発します。位相幾何学による特徴量抽出や、統計的機械学習を活用し、実験データから知識抽出を行います。



あたらしい機能材料の創製



超高分解能の機能解析



マテリアルズインフォマティクス

Appl. Phys. Lett. (2019)
AIP Advances (2019)
日経産業新聞(2019)
日刊工業新聞(2019)

Scientific Reports (2018)
JJAP(2019)
Phys. Rev. Lett. (2019)
APEX(2017)

Npj Comp. Matt(2019)
JST ACT-I(2018)
学長賞(2019)
理科大奨励賞(2019)

マテリアルズ インフォマティクス： 材料科学と情報科学の融合

材料科学

- ・物性
- ・機能
- ・プロセス



研究者の経験と直感で
最適解を探索



情報科学

- ・データ可視化
- ・特徴量設計
- ・機械学習



データに基づいた
効率的な材料探索・解析



材料機能の予測とデザイン

電池材料



高分子材料



電子材料



触媒材料



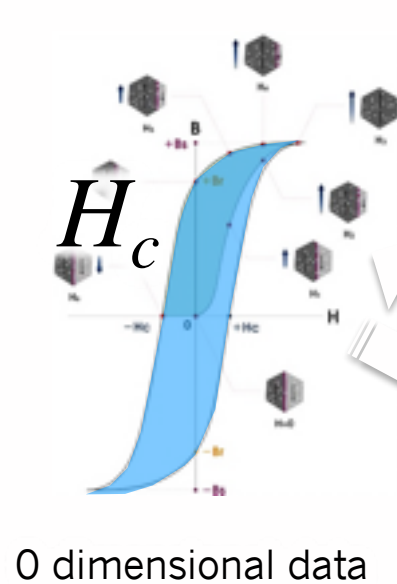
磁石材料



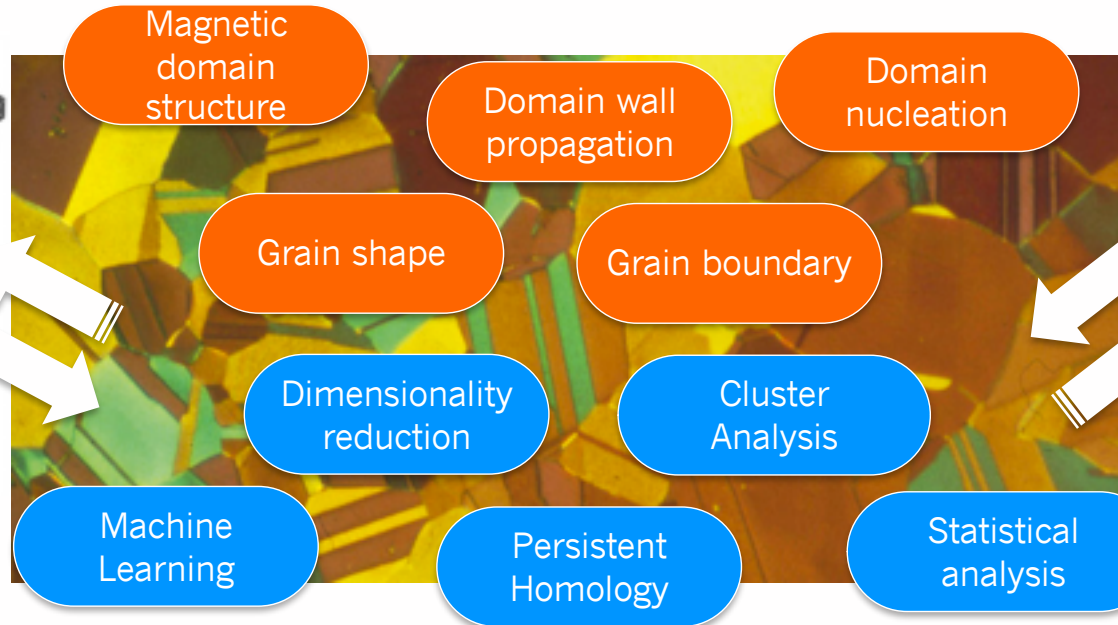
- ・高効率モーター
- ・スピントロニクスデバイス
- ・レアメタルフリー磁性体

Purpose&Strategy

Coercivity



Microscopic analysis



放射光顕微分光
Kerr顕微鏡
時間分解計測

Multi dimensional
data

特徴量空間を介したリンク構築

Strategy

- ・ 金属組織の自動抽出(分光データ、回折データの自動解析)
- ・ **パーシステントホモロジー**を用いた磁区構造からの特徴量抽出
- ・ パーシステンス図と磁気機能との関係構築

先ほどプレスリリースがでました
Nature Partner Journal
Computational Materials
5 (2019) 39

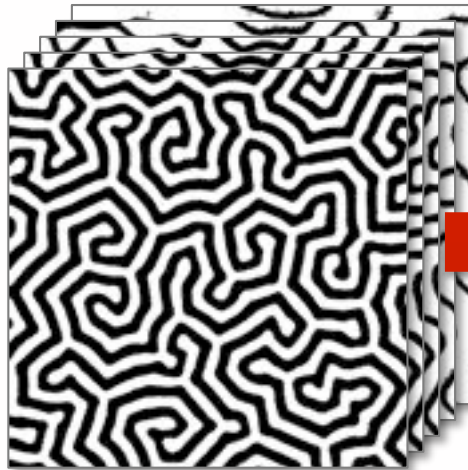
本日の話題

表面真空学会誌
表面と真空
62, (2019), pp 153-160

特徴量空間を介したミクロ組織とマクロ機能の接続

Structure

Magnetic domain

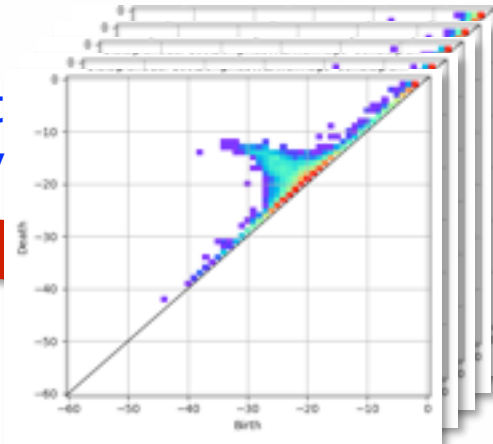


(x, y, H)

Persistent
Homology

Feature space

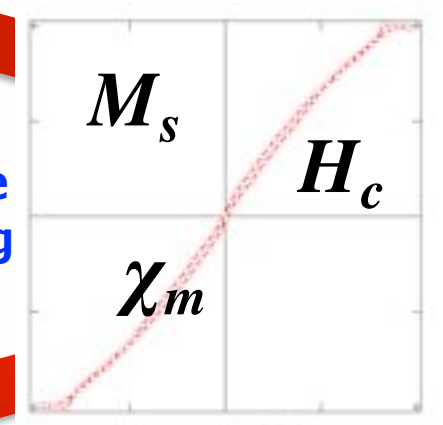
Persistence Diagram



$(\text{birth}, \text{death}, H)$

Property

Macroscopic function



Magnetic Field

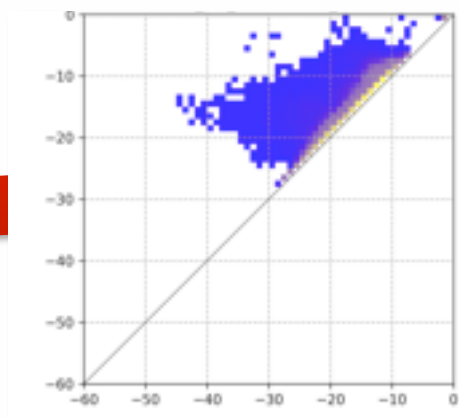
Magnetization

Inverse
Analysis



(x, y)

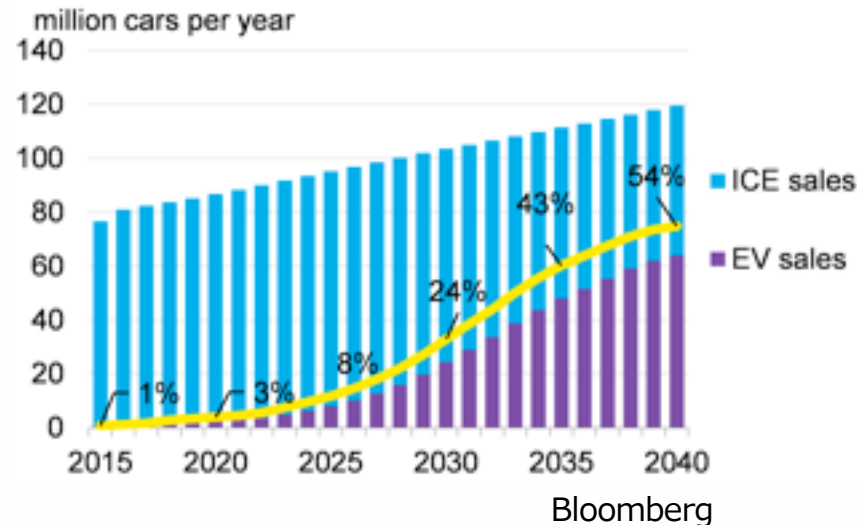
Machine
Learning



$(\text{birth}, \text{death})$

Social Needs and Issues in Technology

電気自動車の需要予測



electric vehicles

Motor



EV30@30

2030年までに新車販売台数のうち
電気自動車の占める割合を30%以上に増やす



カナダ、
フィンランド、
フランス、
日本、
中国
等

軟磁性材料(電磁鋼板)

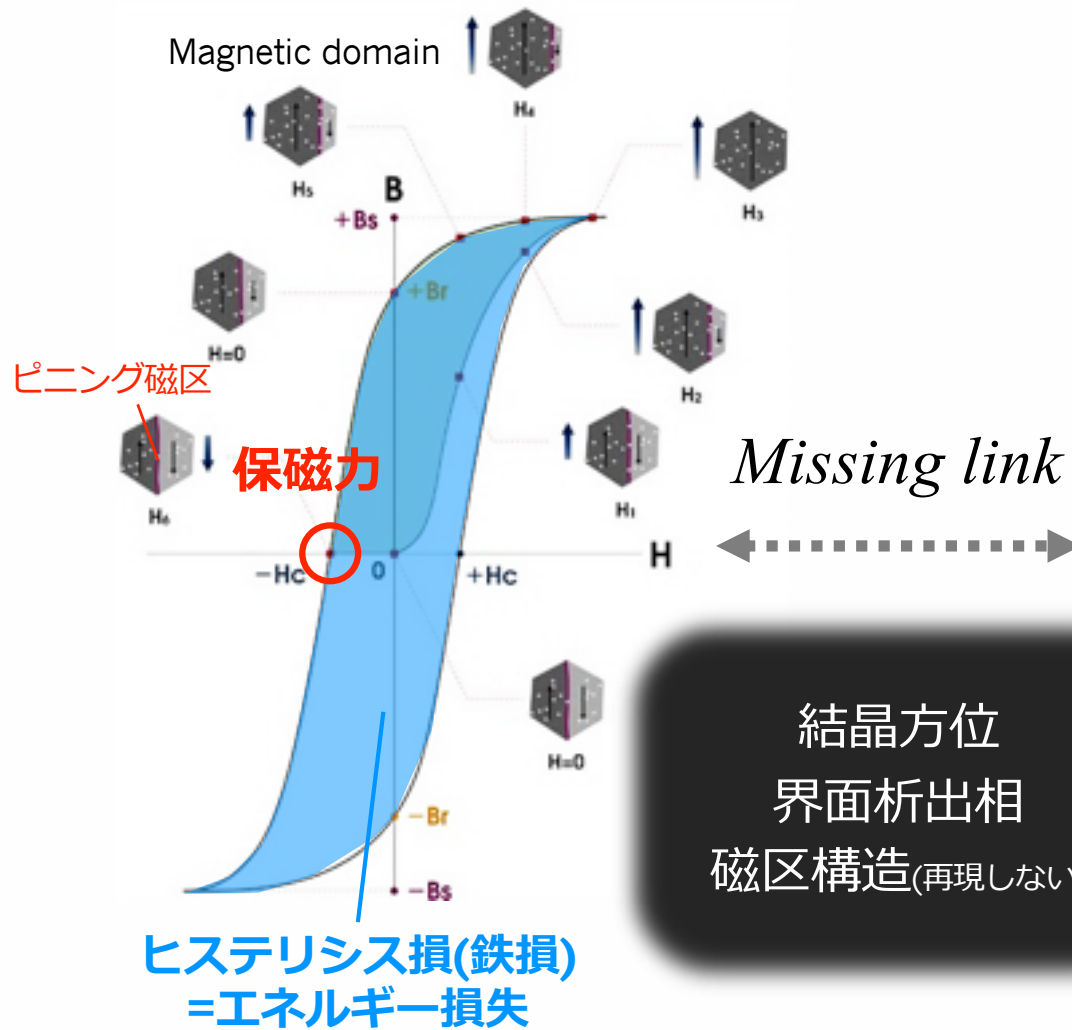
小さな保磁力 → ヒステリシス損の低減

硬磁性材料(永久磁石)

大きな保磁力 → 最大エネルギー積の向上

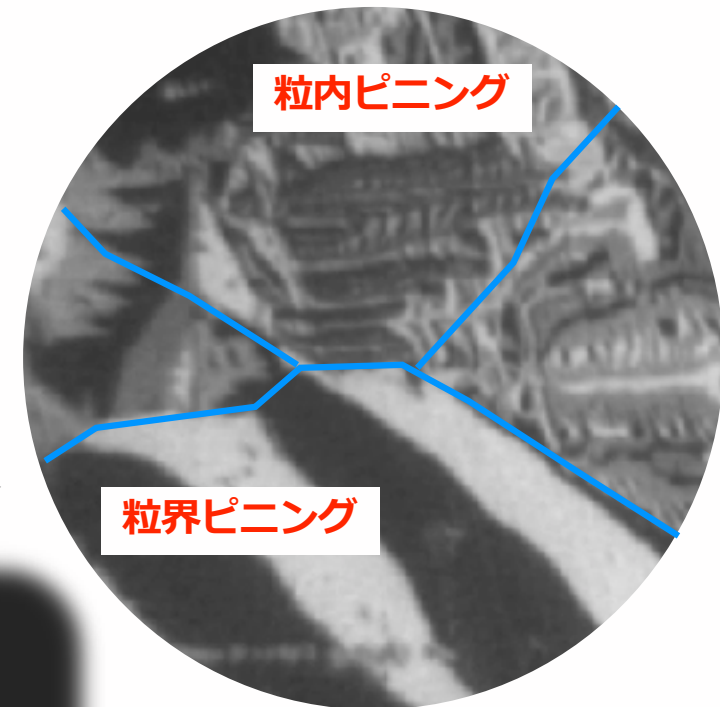
磁性材料における階層性

磁気ヒステリシス



磁区構造

無方向性電磁鋼板



ピンング磁区

SPRING-8 2018A期(6/10)

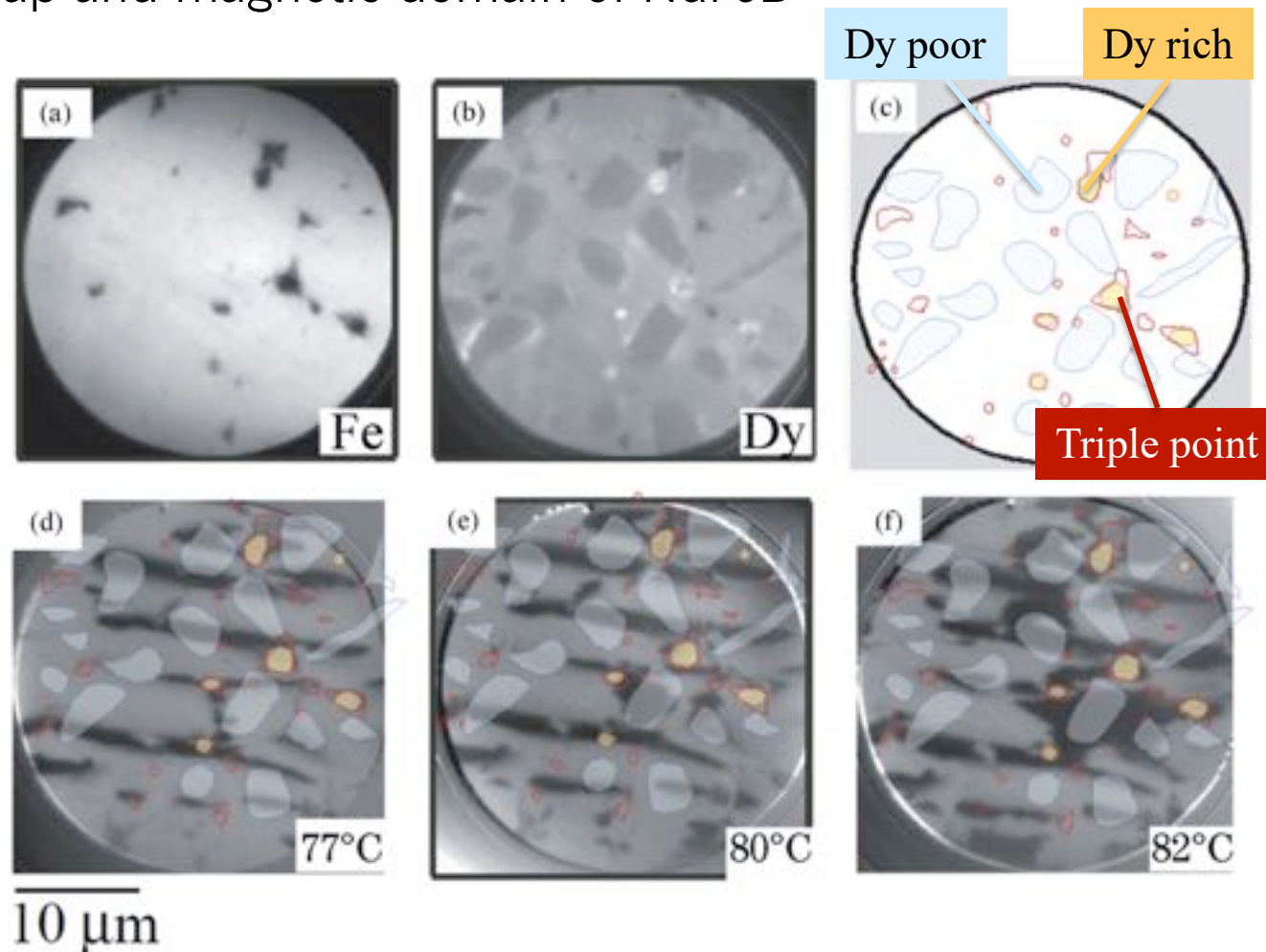
結晶方位
界面析出相
磁区構造(再現しない)

マクロ機能とミクロ組織の相関は未だ完全につながっていない

Synchrotron radiation analysis

R. Yamaguchi et al.
IBM J. Res. Dev. 55 (2011) 12

Chemical map and magnetic domain of NdFeB



Microscopic property: Magnetic domain, Segregation, Metallographic structure

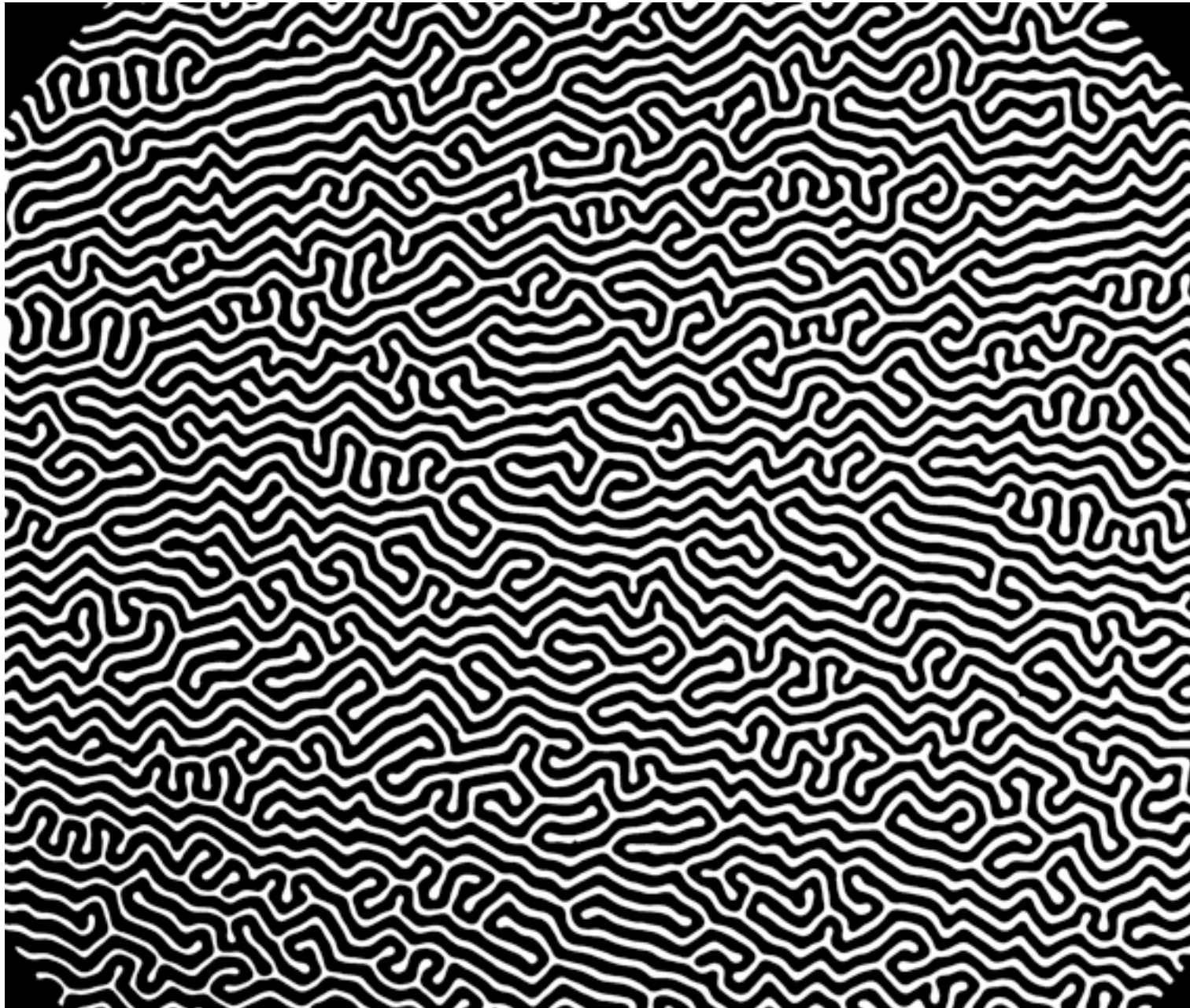


How they correlates?

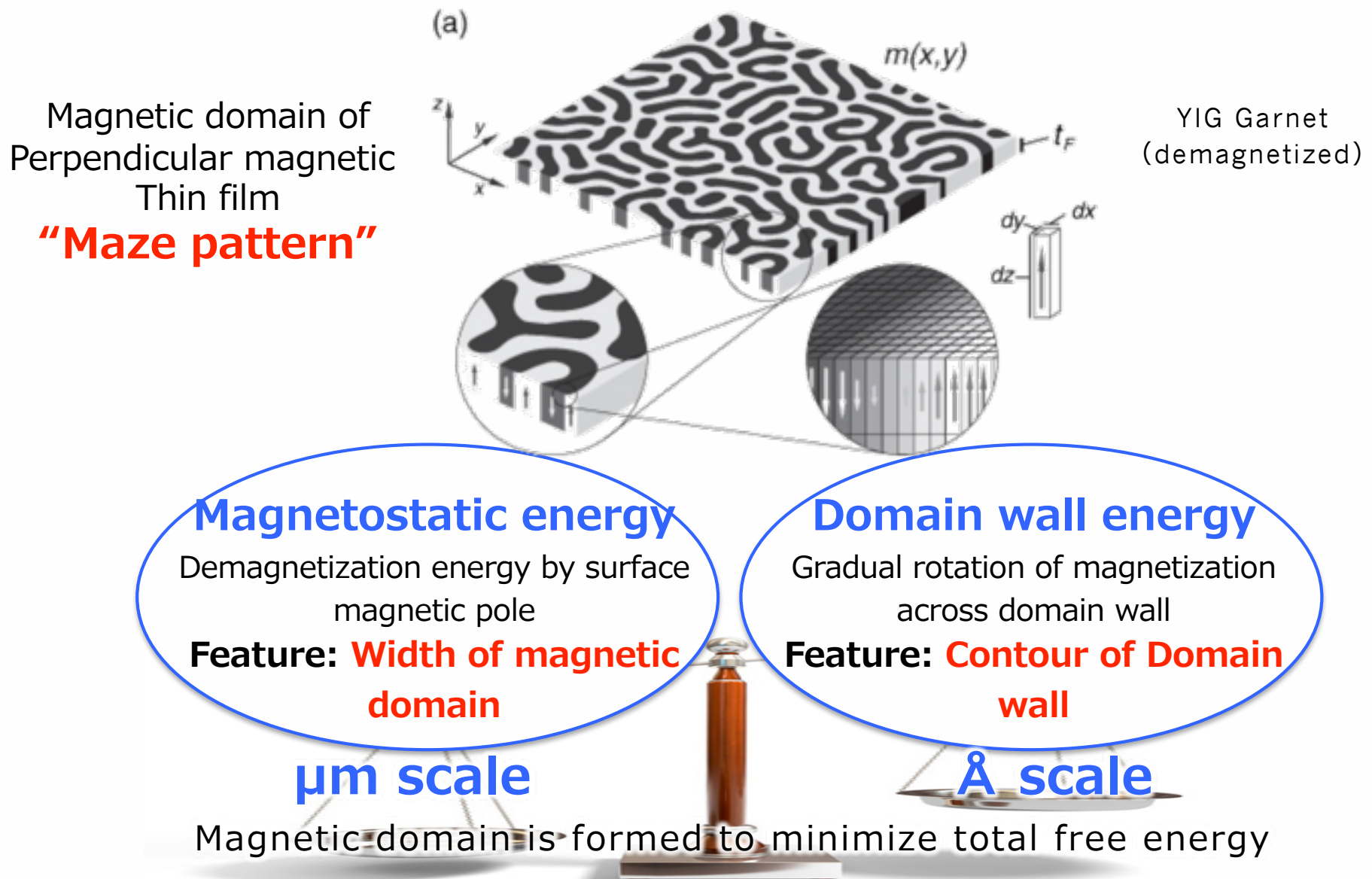
Macroscopic property: Coercivity, Magnetic moment

Magnetic domain structure (vs magnetic field)

10



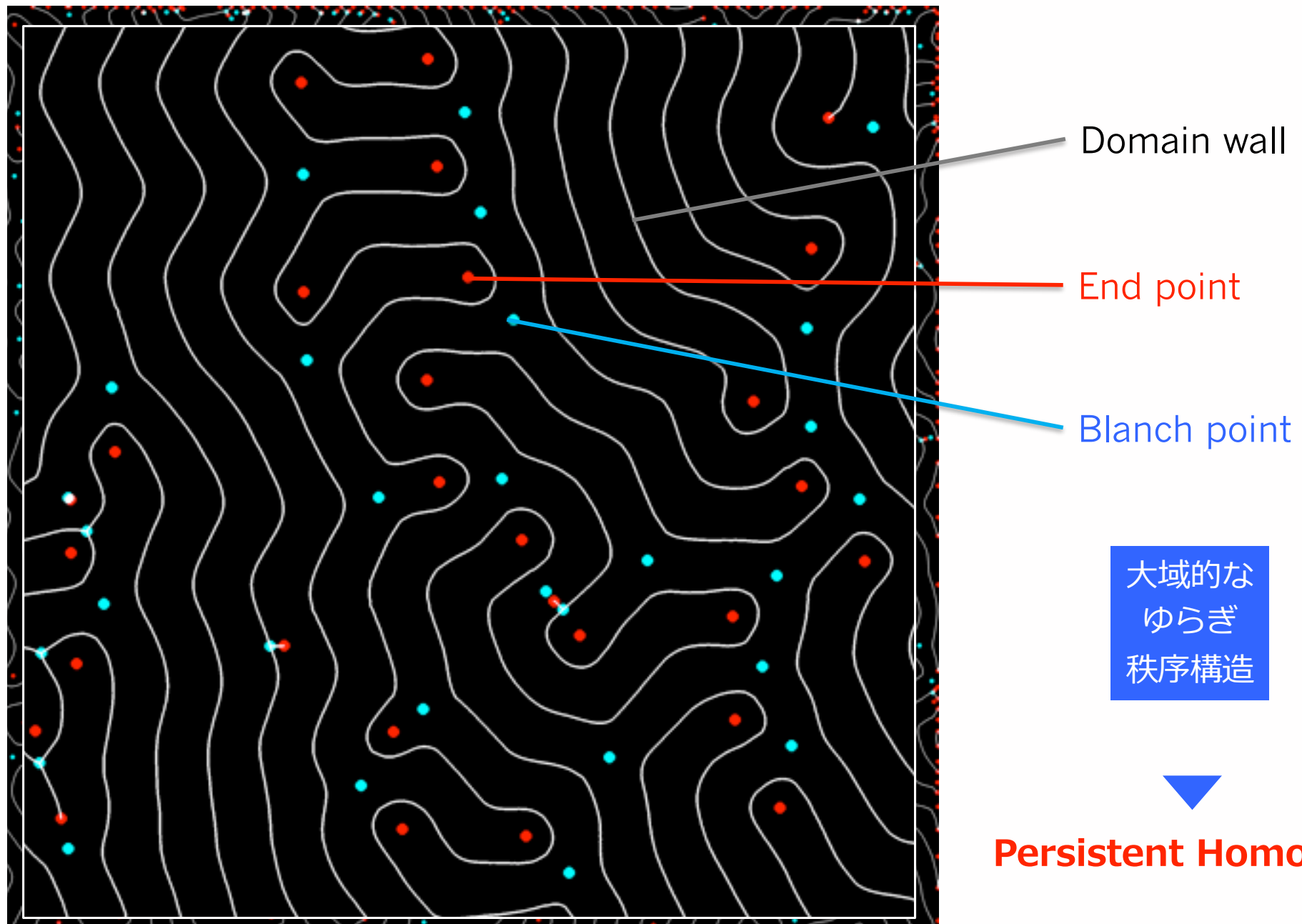
magnetic domain structure



LLG equation can not explain origin of coercivity completely

Classical image analysis of magnetic domain

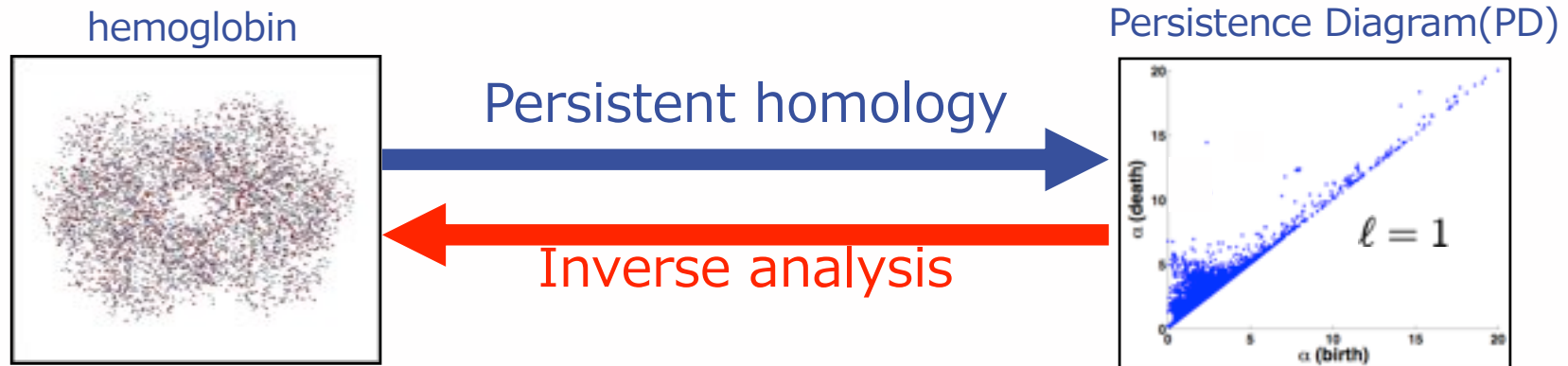
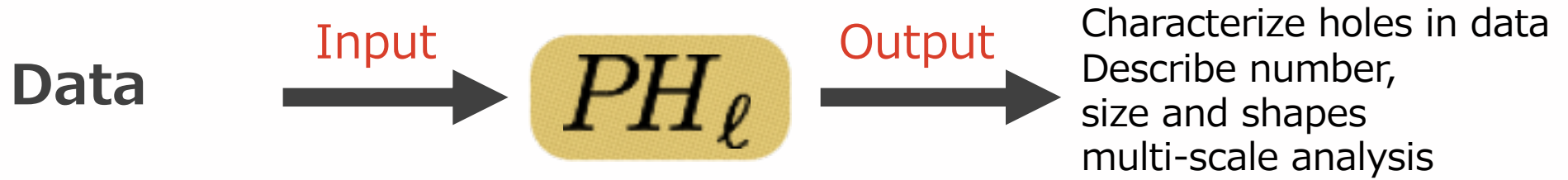
14



Persistent Homology

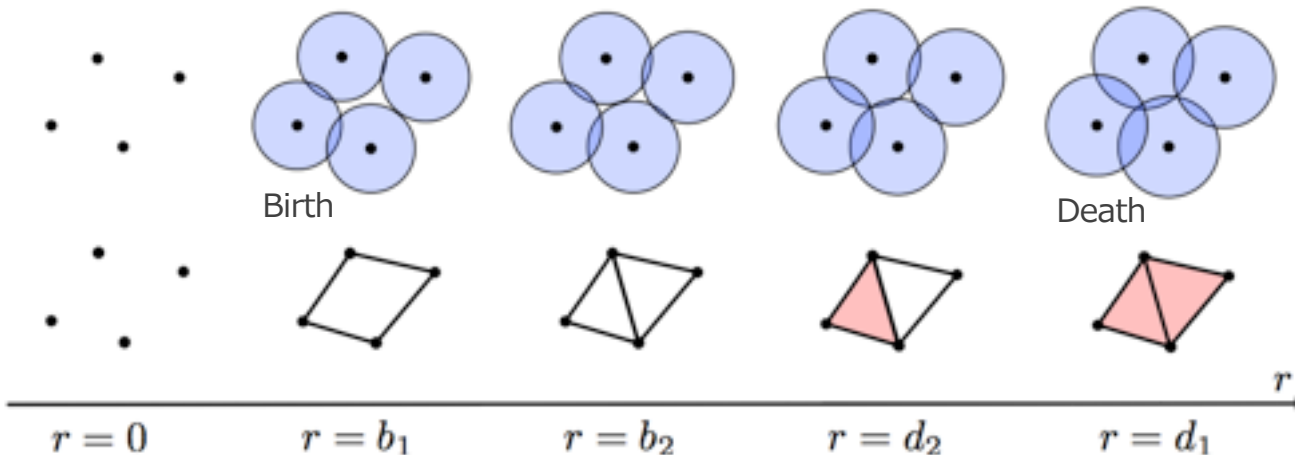
Edelsbrunner, Carlsson (2003, 2005)

Obayashi, Hiraoka arXiv:1706.10082v2

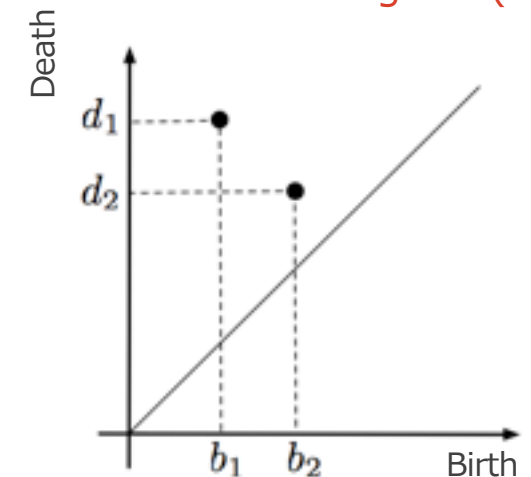


PD of point cloud

Fattening (Filtration)



Persistence Diagram (PD)

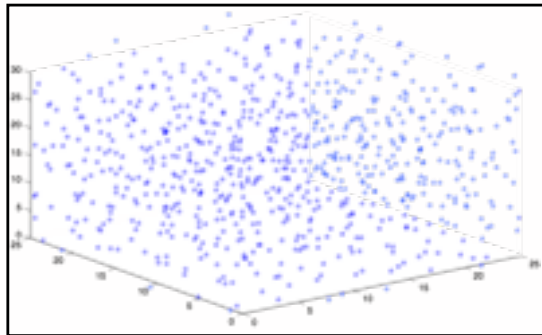


Application

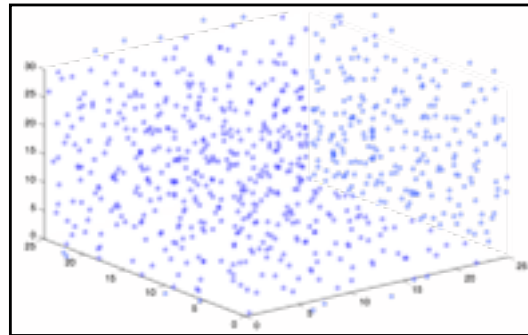
Y.H., et al. PNAS (2016)

Atomic configurations of silica (SiO_2)

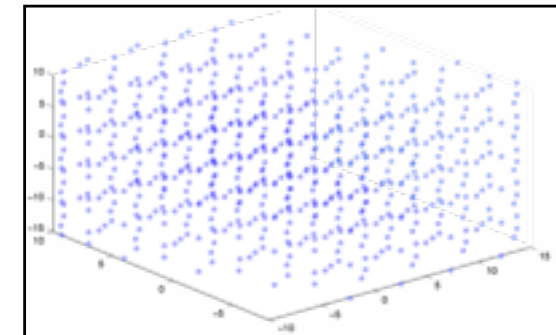
liquid



glass



crystal

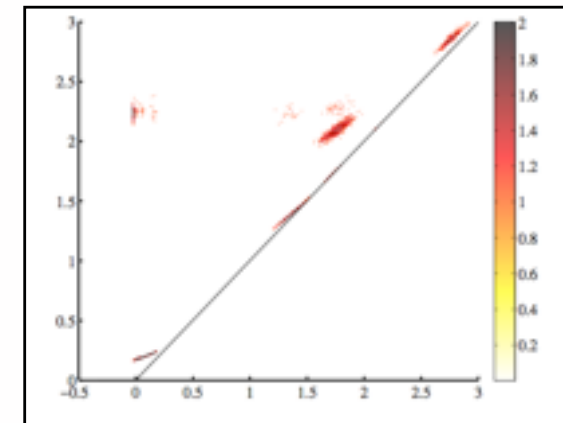
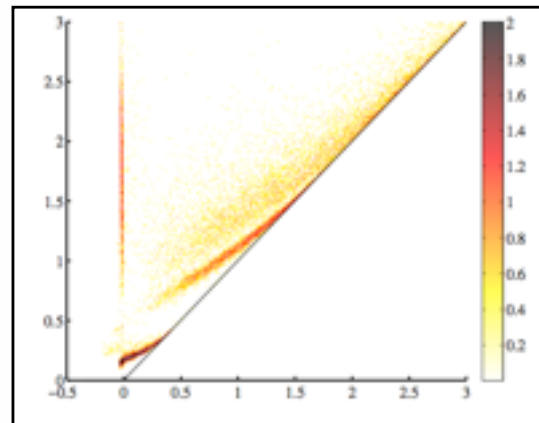
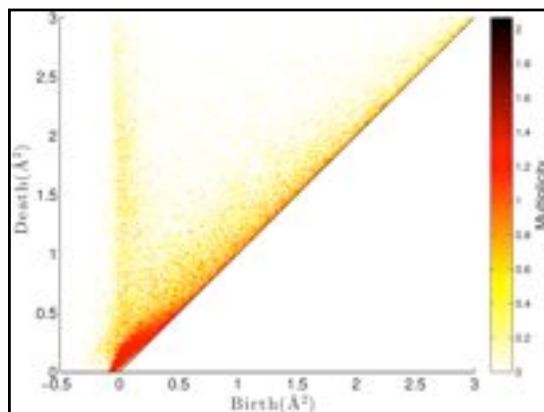


MD simulation



1 dim persistence diagrams of silica

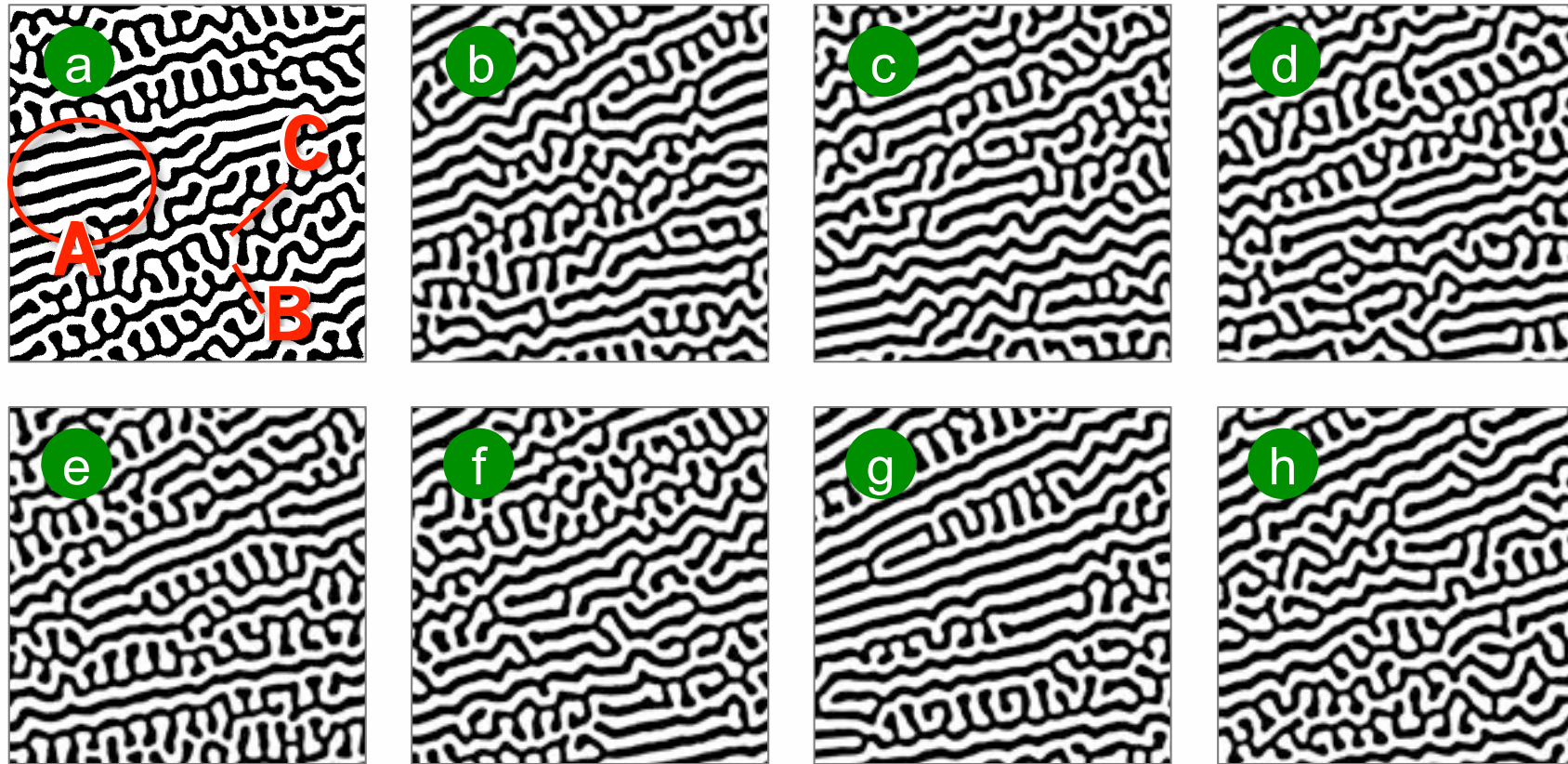
HomCloud



記述子としての有用性の検証

視野サイズ 1300um×1300um

同一位置、同一磁場、異なるヒステリシスループでの磁区構造



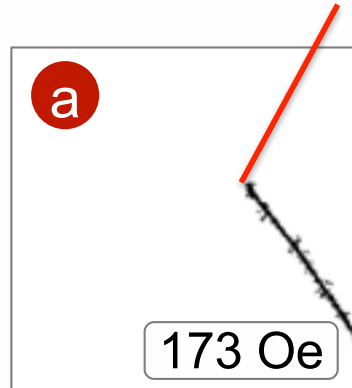
ループ毎に異なる微細組織
大域的な特徴は類似

マクロな磁化(画像の輝度)は同一で、ミクロな分岐構造が異なる磁区構造

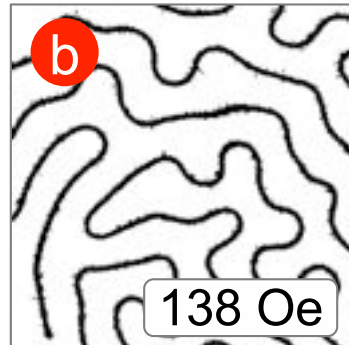
磁区構造の外部磁場依存性

視野サイズ 1300um×1300um

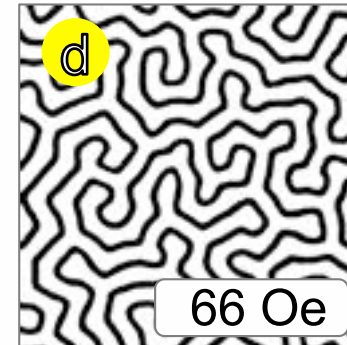
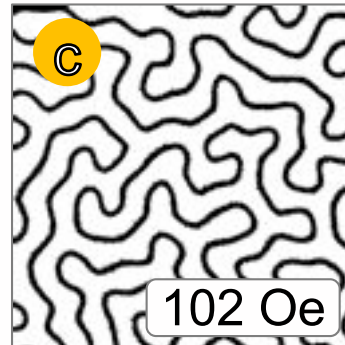
逆磁区の生成



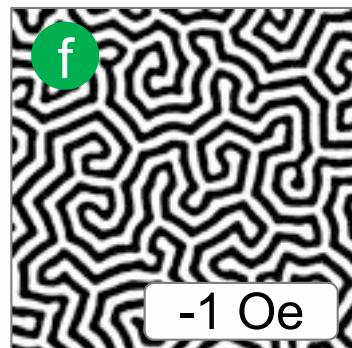
逆磁区の進展



複雑性の増大

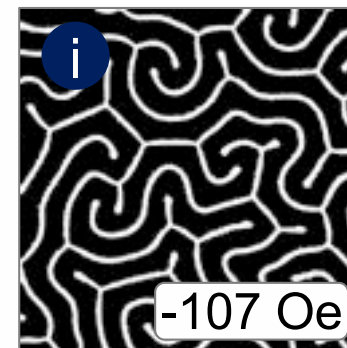
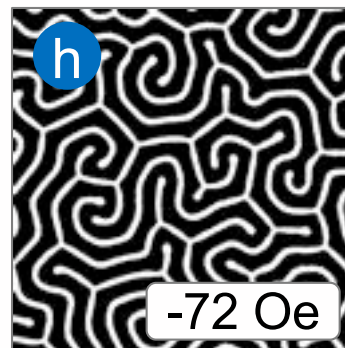


迷路状磁区の形成

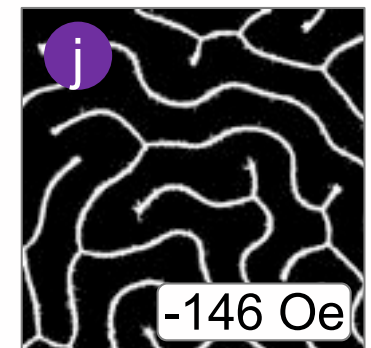


保磁力近傍

徐々にほどける



飽和へ



外部磁場に依存して、磁区構造が連続的に変化

Summary

- ・ **トポロジカルデータ解析**を迷路状磁区構造に適用し、磁化反転過程におけるピンングサイトの可視化を試みた。
- ・ **パーシステントホモロジー**を用いて、磁区構造のトポロジカルな特徴を抽出した。
- ・ 主成分分析を用いて**パーシステンス図**と**磁気ヒステリシスの対応関係を構築**した。
- ・ 最終的に、**ピンングサイト(トポロジカル欠陥)**を**自動的に可視化**することができた。

Acknowledgements

東京理科大学 小嗣研究室 (Tokyo Univ. Science, Kotsugi Lab.)

山田拓洋(Yamada Takumi)、鈴木真悟(Suzuki Shingo)、鈴木雄太(Suzuki Yuta)

東北大学AIMR (Tohoku Univ. AIMR)

平岡裕章(Hiraoka Yasuaki)

赤木和人(Akagi Kazuto)

大林一平(Obayashi Ippei)

KEK-PF

小野寛太(Ono Kanta)

QST

上野哲朗(Ueno Tetsuro)

NIMS

三俣千春(Mitsumata Chiharu)

小嗣真人(Kotsugi Masato)

専門：放射光計測、磁性材料

2015～ 東京理科大学

2007～ SPring-8

2003 広島大学放射光センター

2001～ Max Planck 研究所