

動的機能空間の高時間分解能解析

-高速応答空間材料創製の設計を目指したAI検出器の開発-

SyncMOF株式会社・堀 彰宏

エネルギー資源の動向

エネルギーとしての ガスの重要性

19世紀

固体_石炭



20世紀

液体_石油



21世紀~

ガスの時代へ



これからの高機能多孔性材料

ガス・蒸気を 「貯蔵 / 分離」できる

MOF Metal Organic Framework

MOF は目的に合わせて自由に設計が可能

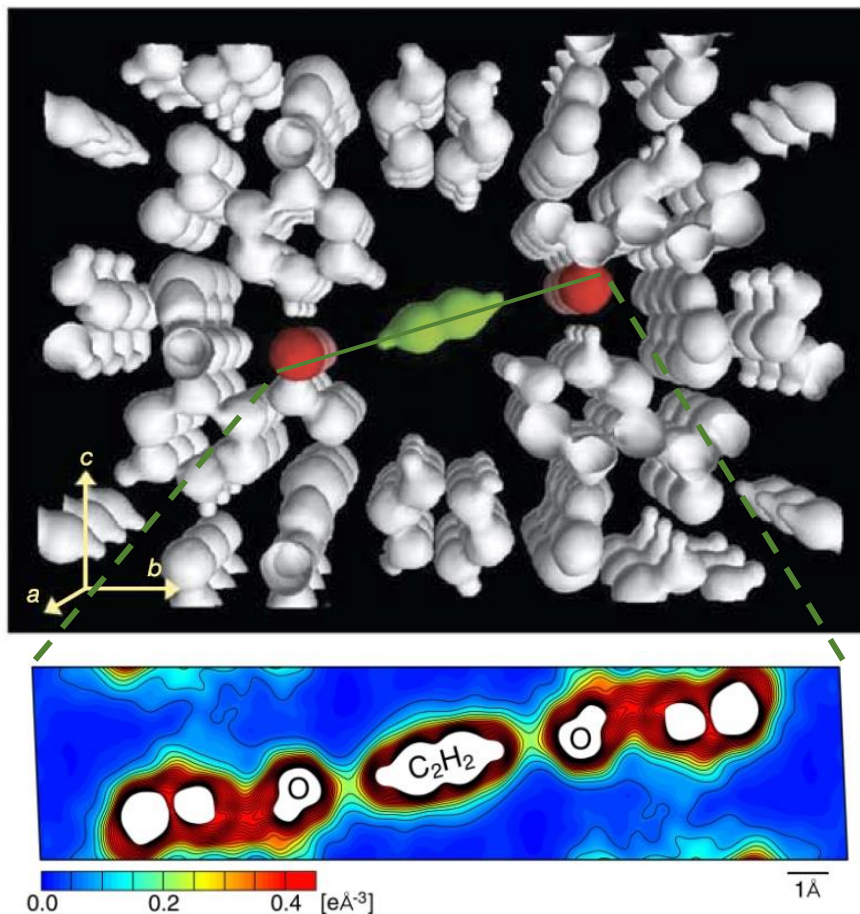
有機配位子

金属イオン

これまでのMOFナノ細孔中におけるガス吸着の構造科学

CPL-1

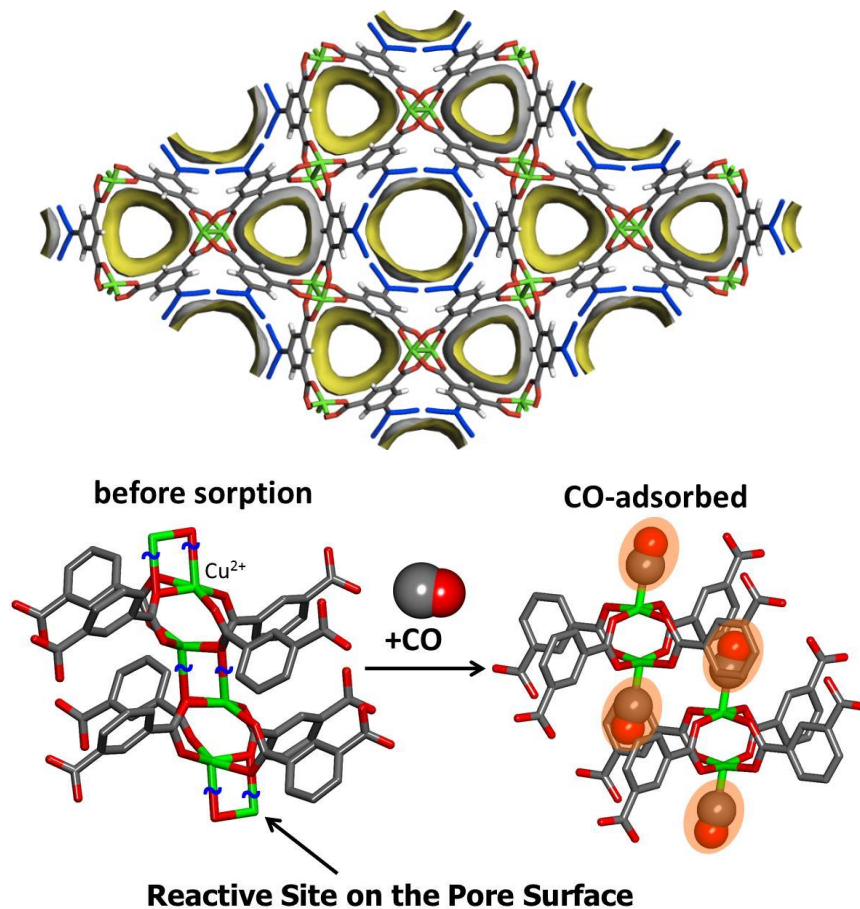
アセチレンの高密度濃縮
Cu-pyrazine-2,3-dicarboxylate-pyrazine



R. Matsuda et al., *Nature*. 2005, 436, 238

KGM-1

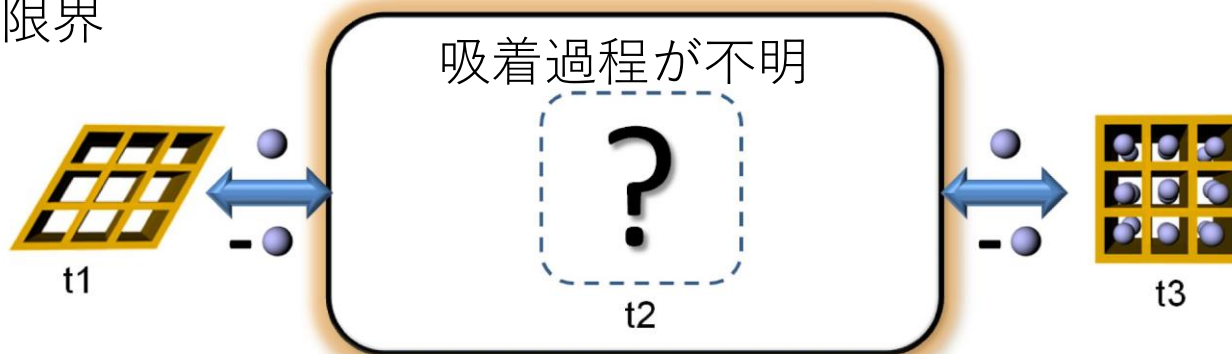
COの選択的吸着
 $[Cu_2(N_3-ipa)_2]$



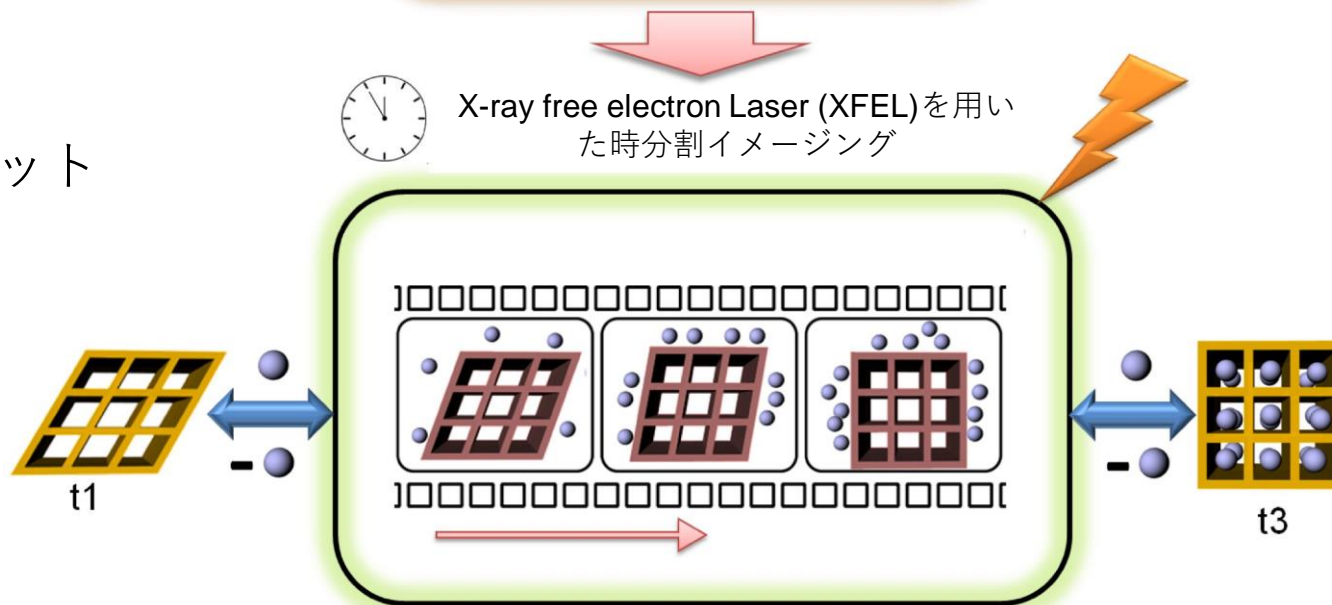
R. Matsuda, A. Hori et. al., *Science* 2014, 343, 167

高時間空間分解能測定の意味 (XFELを例にして)

既存研究の限界



本ターゲット

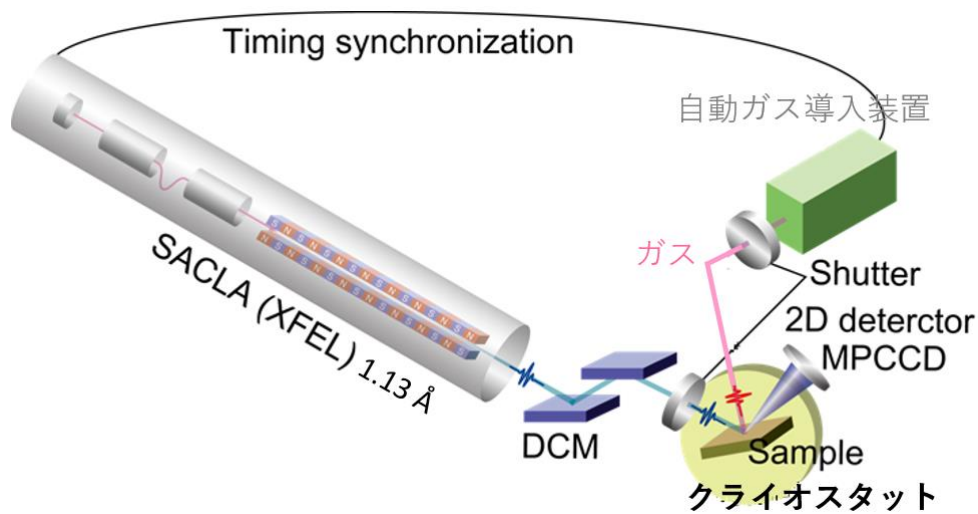


高時間分解能測定による動的吸着過程の解明

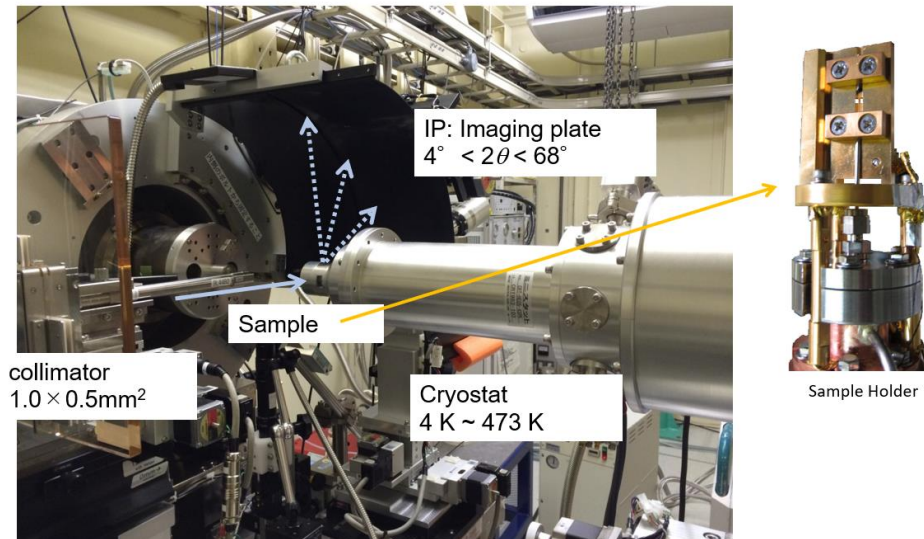
SPring-8で構築してきたガス吸着下での高時間分解能計測技術



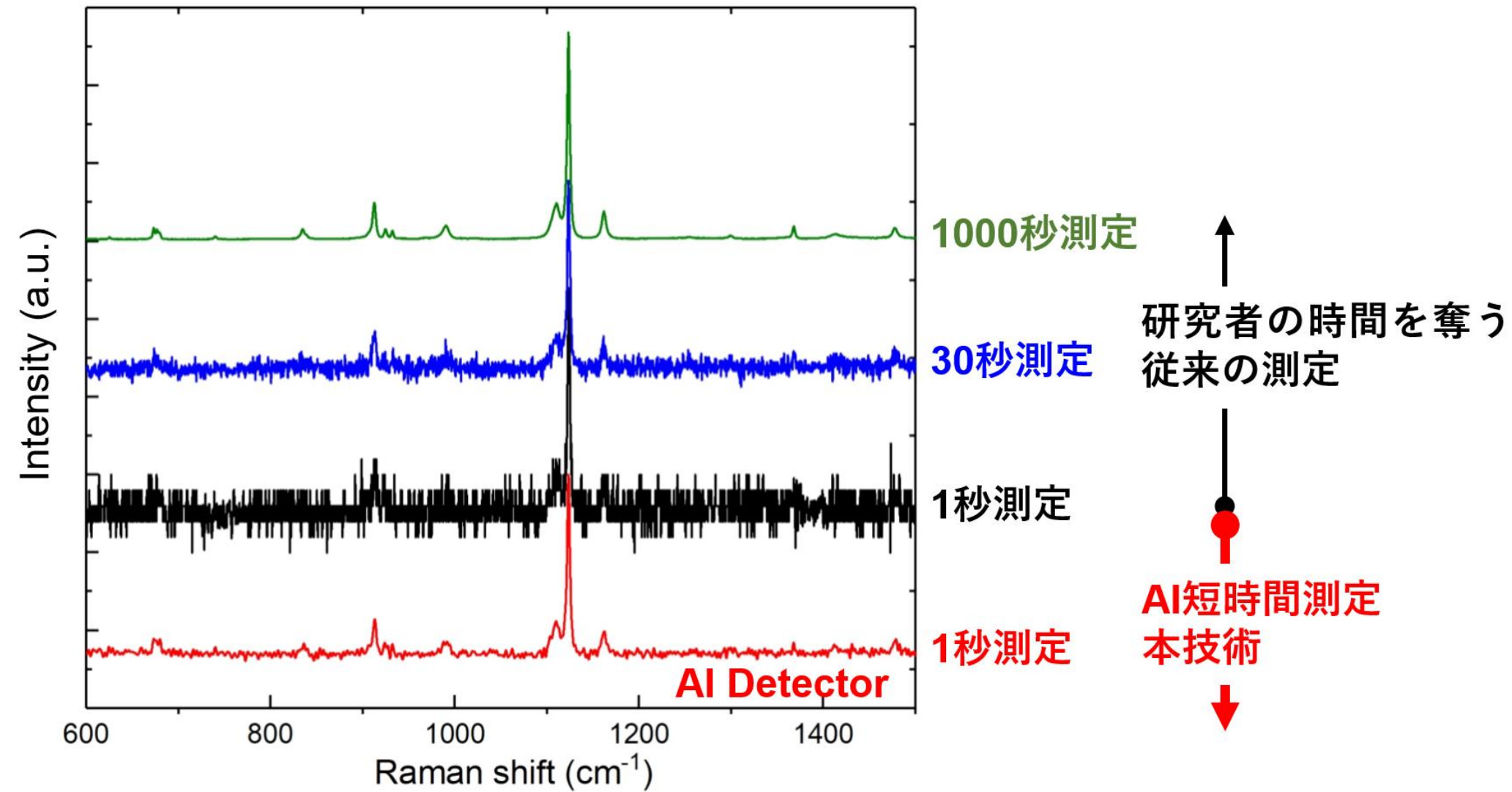
SACLA(XFEL)



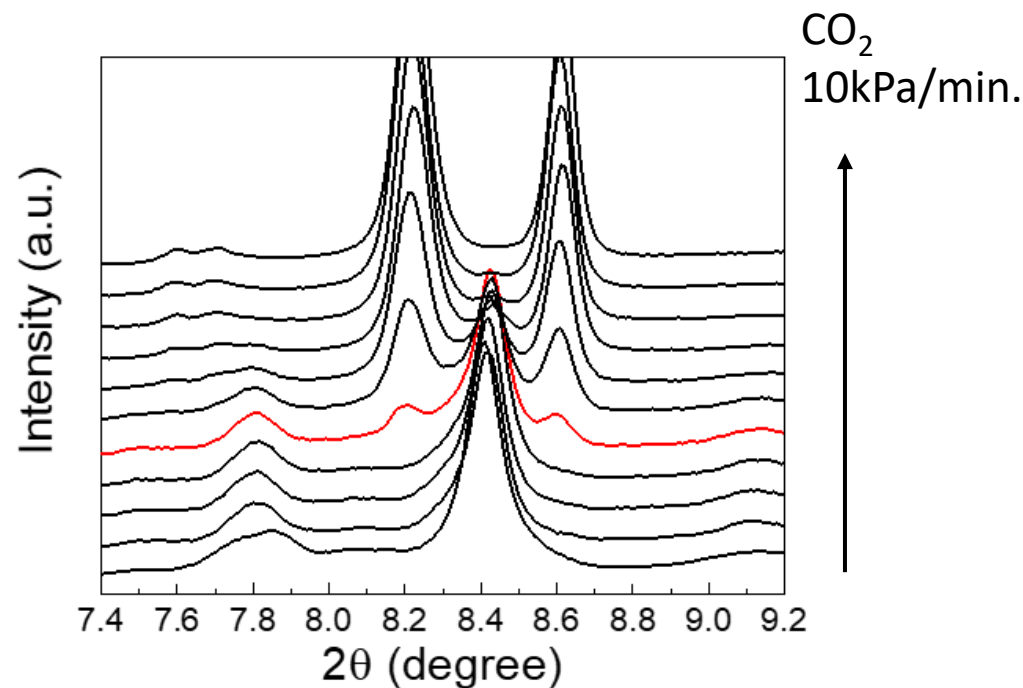
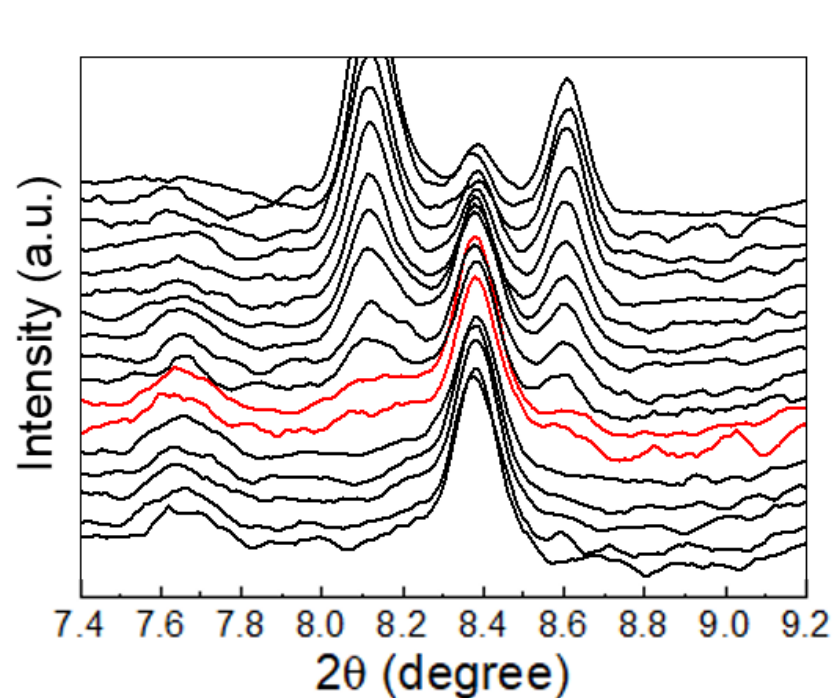
BL44B2



AI技術を利用した高時間分解能測定（ラマン散乱）



AI技術を利用した高時間分解能測定 (XRPD)



AI処理により、バックグラウンドとピークが明確に区別できるようになっていることが分かる。AIによるこのような処理により、短時間露光でもデータ解析が可能であることが分かった。しかし、一方で、AIにおける機械学習に必要な学習データが不足しているため、8.4°付近のピークの識別が困難であるという問題が生じた。この問題を解決するためには、検出器毎のデータの蓄積が必要であることが分かった。