

解析を容易にする統合型電気化学 インピーダンス解析ソフト

物質・材料研究機構

機能性材料研究拠点

セラミックスプロセッシンググループ

主幹研究員 小林 清

2020年6月18日

電気化学インピーダンス分光法

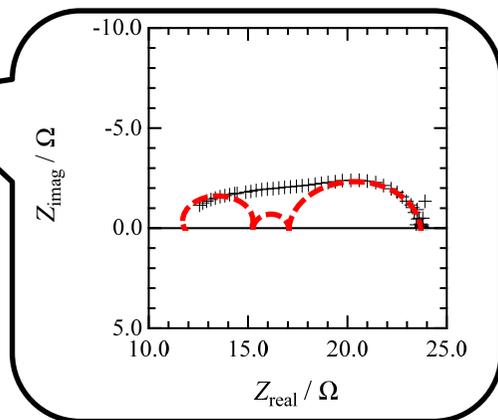
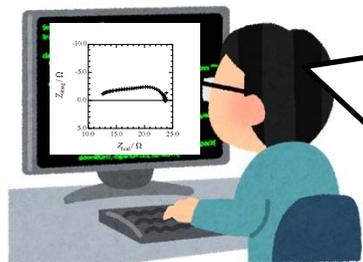
- 非破壊の電気信号分析
- 測定装置の汎用化により一般的な測定法へ
- 様々なデバイスや電気化学反応の解析に応用
 - ✓ エネルギー変換デバイスの電気化学反応解析
 - ✓ 表面処理コート(腐食・防蝕)特性の評価
 - ✓ 有機半導体デバイス評価

測定は容易になったが解析が難しい
解析を容易にする新しいソフトウェアが必要

新しいインピーダンス解析ソフトの概念

第一段階

(ユーザー)解析イメージ

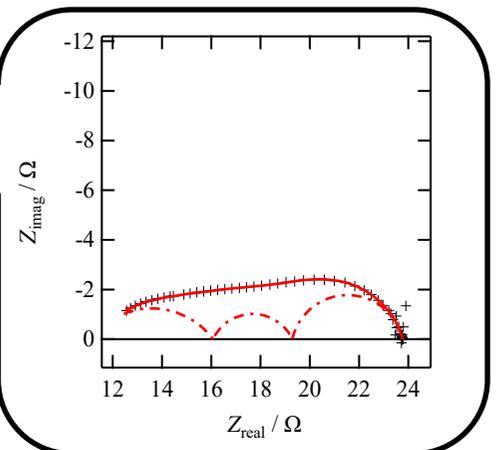
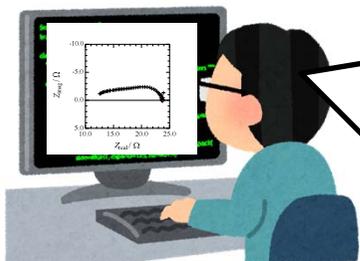


GUIを介してソフトウェアと解析イメージを共有

- ・GUI操作で部分スペクトルを当てはめ
(動的モデル構築)
- ・データサンプリングにより初期値を計算
(グラフをインタラクティブなユーザーインターフェイスとして活用)

第二段階

詳細結果の可視化



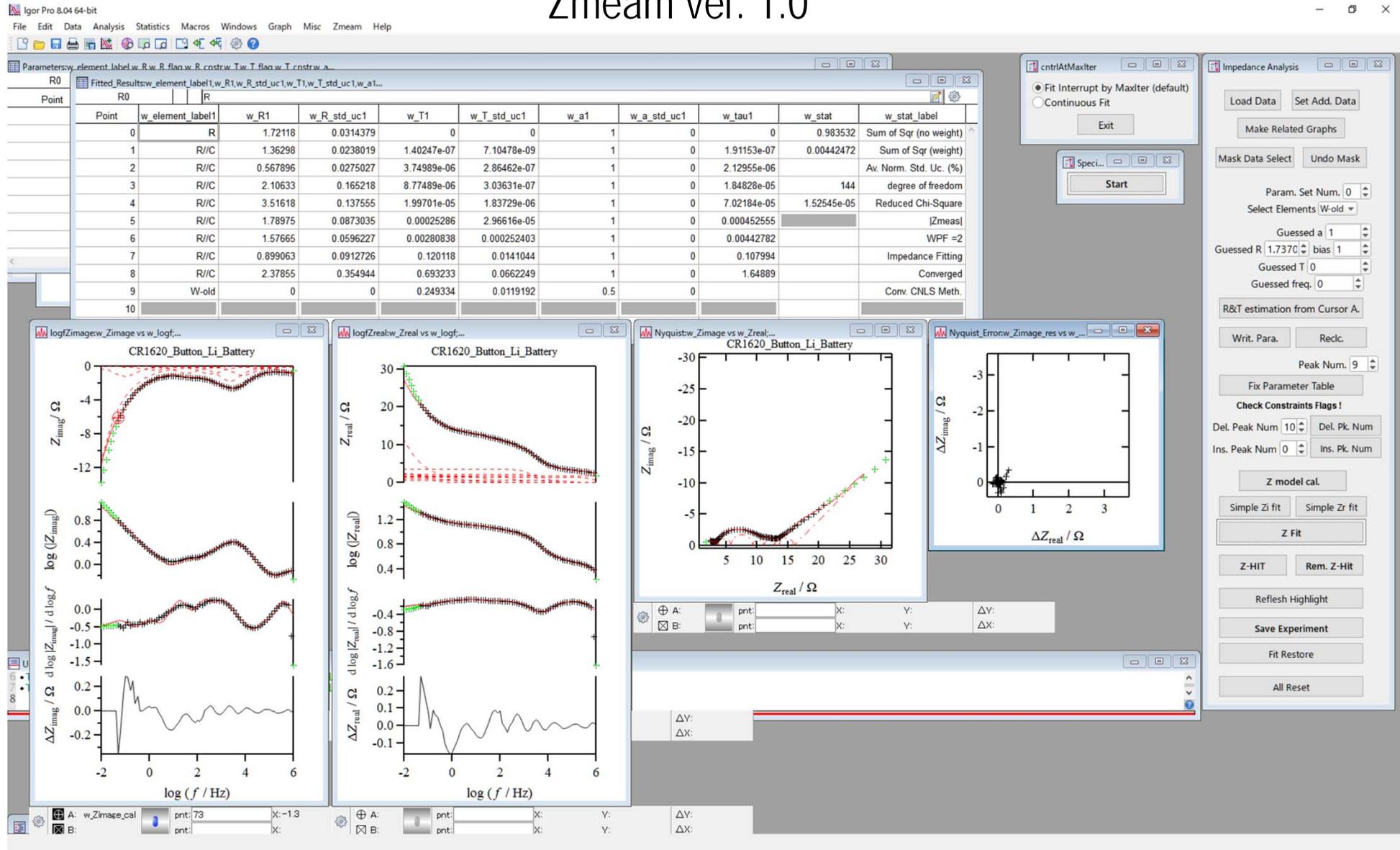
結果の可視化:
スペクトル全体の計算結果
+
部分スペクトルの計算結果

容易に解析結果の妥当性を確認

- ➡ インピーダンス解析が容易に
- ➡ 部分スペクトル寄与が明確化
- ➡ 経験を積むほどに解析が上達!

新しいインピーダンス解析ソフト外観

Zmeam ver. 1.0



Igor Pro[®]マクロプログラム
Igor Pro[®]: Wavemetrics社製汎用解析ソフトウェア

実際のデータ解析における諸問題

➤ モデル(等価回路)で再現できないデータ, 周波数領域

何が悪い?(データ? モデル? ソフトの使い方?)

➤ 当てはめるべきモデル(等価回路)が不明

非理想的な形状のスペクトルはどうすればよい?

➤ 最小自乗計算でエラー出力

モデルは問題ないように見えることが多い. なのになぜ?

従来の方法は下記を前提とする解析法

- ✓ 測定されたデータは全周波数領域をモデル化可
- ✓ ユーザーはデータからモデル(等価回路)を推定可
- ✓ ユーザーは解に近い初期値を入力



根本的に異なる前提に立った
新しい解析ソフトウェア

実際のデータ解析における問題1

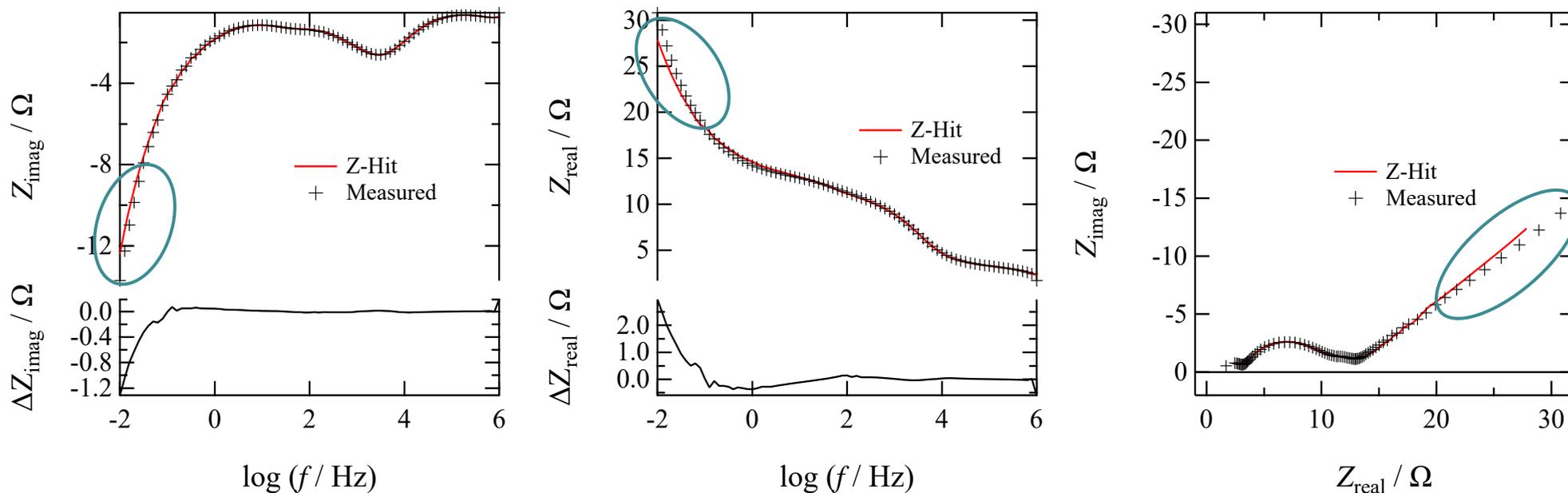
モデル(等価回路)で再現できないデータ, 周波数領域の存在

→ 解析を始める前段階で情報が欲しい

ワンクリックで解ります

蓄電池, キャパシター等のインピーダンスにも適用可能なKK変換テストを実装

市販コイン型リチウム電池のインピーダンス・スペクトル



測定データとKK変換テスト(Z-HIT)が0.1 Hz以下で不一致

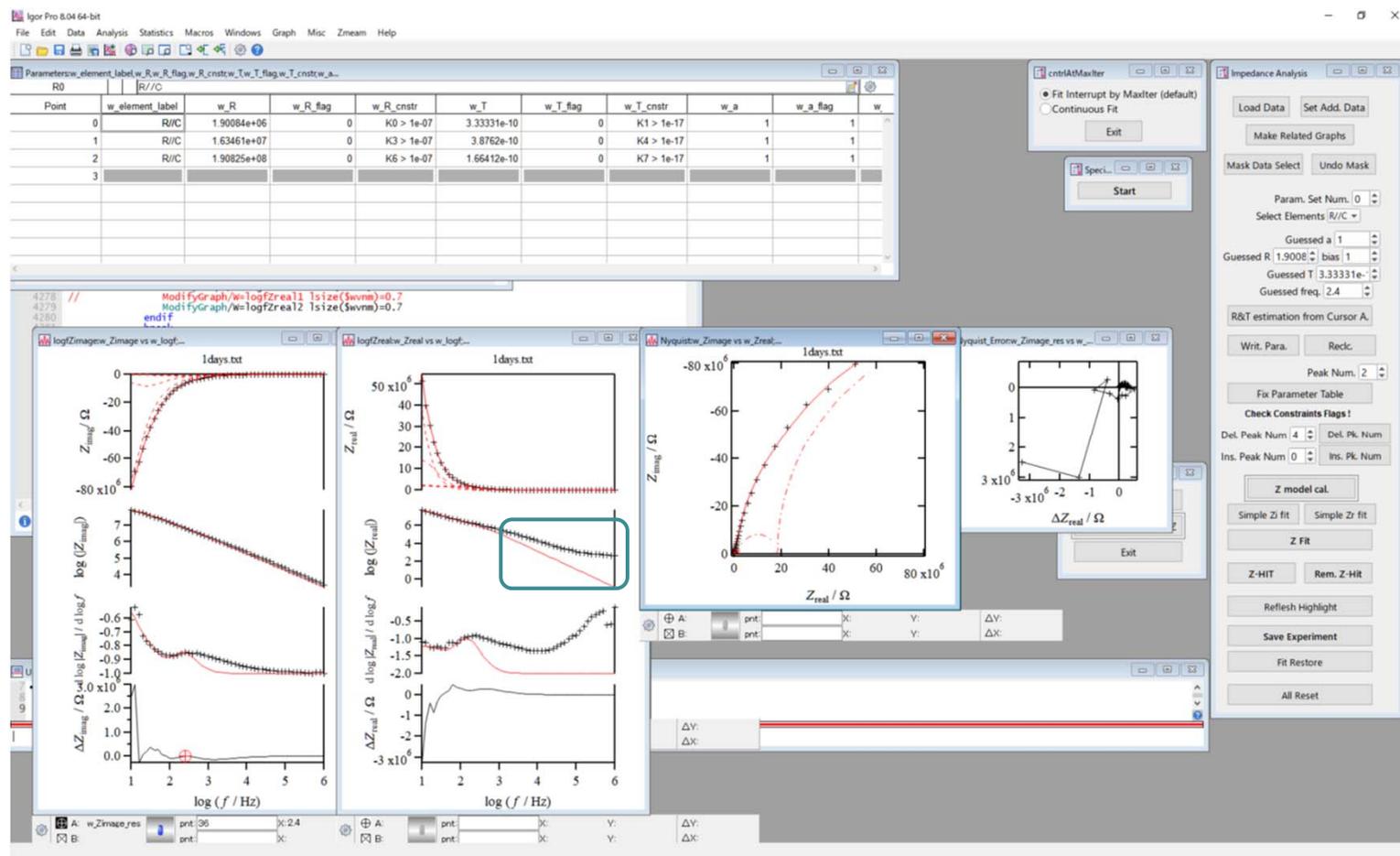
→ 0.1 Hz以下のデータは等価回路で再現できない

実際のデータ解析における問題2

当てはめるべきモデル(等価回路)が不明

わかるところから逐次, 部分スペクトルを当てはめて解くことができます

- ・見た目は単純(に見える)
- ・モデル推定は困難

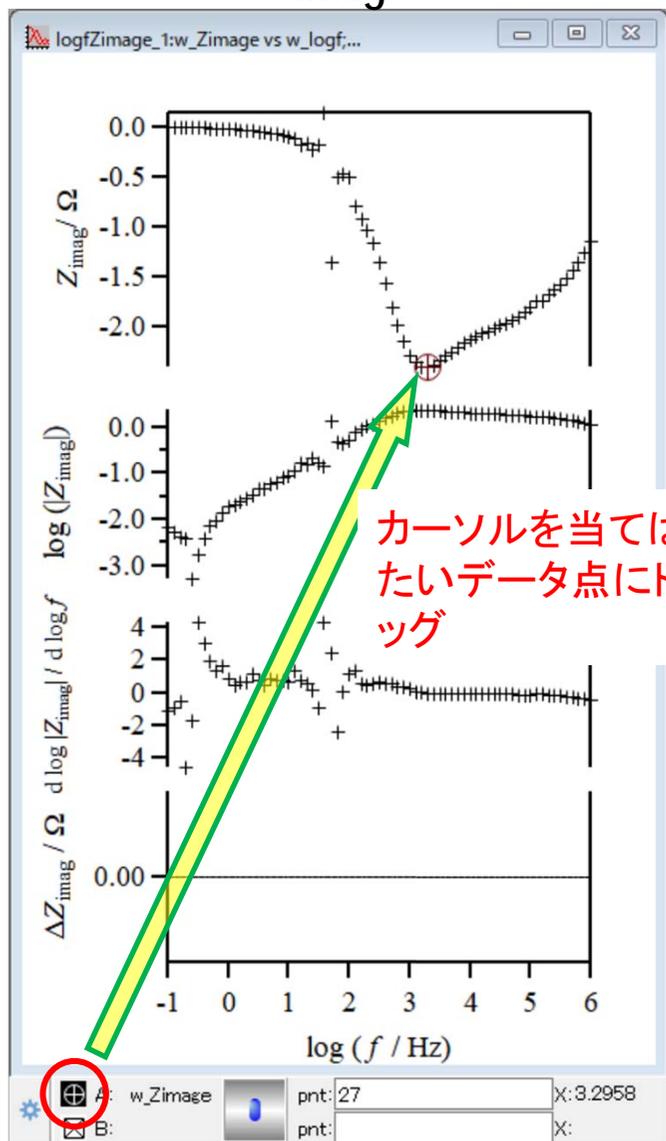


Google Forum: Impedance Spectroscopy, “model of **impedance spectra of epoxy coated aluminum**” posted by Jo at 07 Jun 2016. 下記サイトからデータをダウンロード可
URL: <https://groups.google.com/forum/#!topic/impedance-spectroscopy/VdPDeVVknxU>

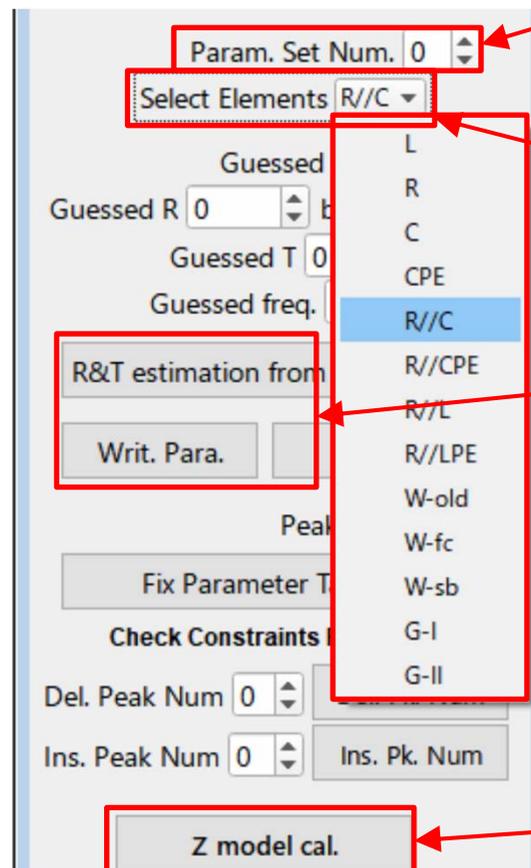
解るところから逐次, 部分スペクトルを当てはめて解いていくことができます

直感的にわかりやすいGUI操作

log f - Z_{imag} プロット



コントロールパネル



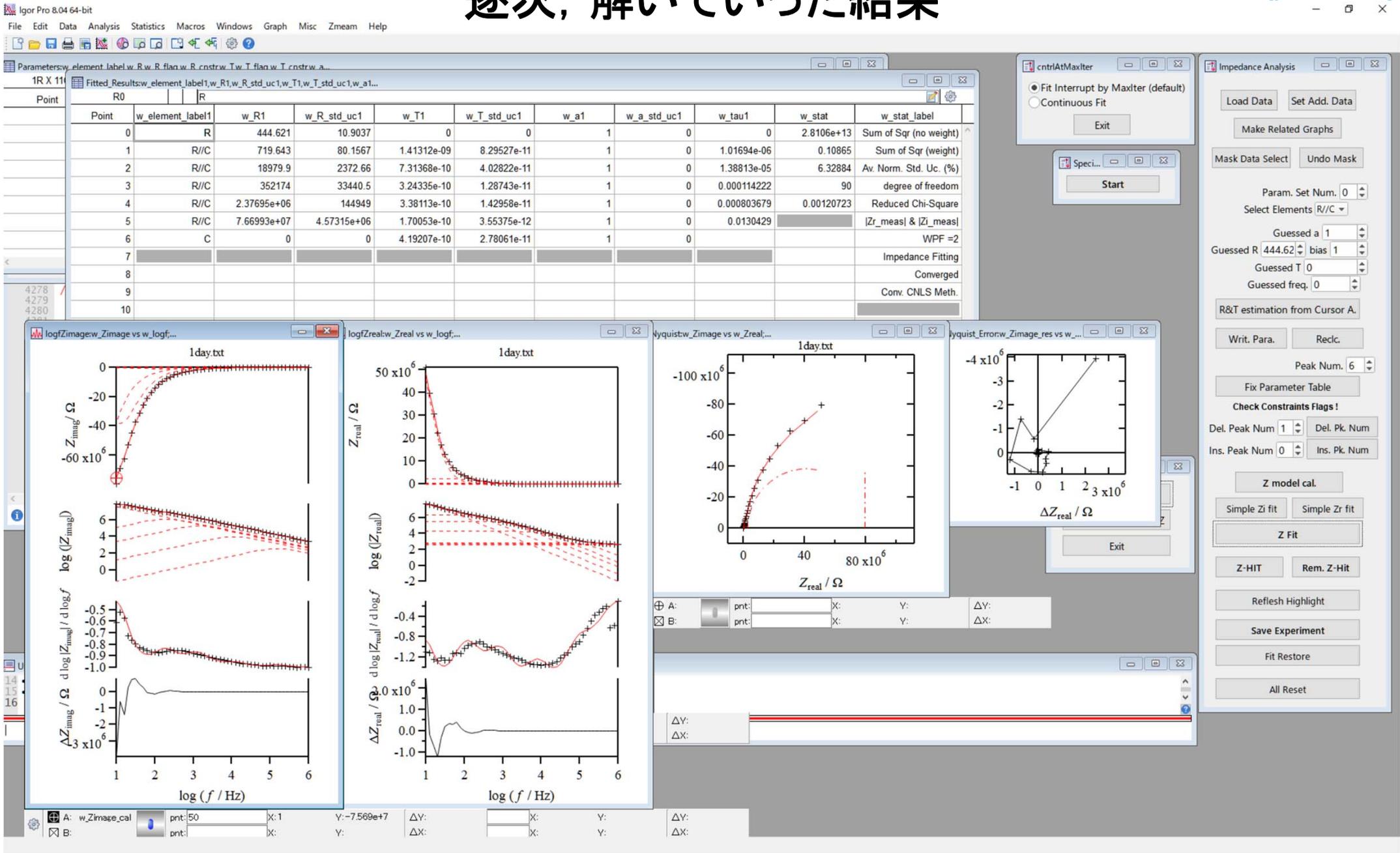
パラメータセット番号を指定

ポップアップから部分インピーダンスのタイプを選択

- 当てはめたスペクトルの計算
- パラメータ・テーブルへの書き込み

グラフへの計算結果表示

逐次, 解いていった結果



- ・逐次解析時, 部分スペクトル要素は時定数により自動再配列
- ・部分スペクトルの割り当て順を気にすることなく動的にモデル構築できます

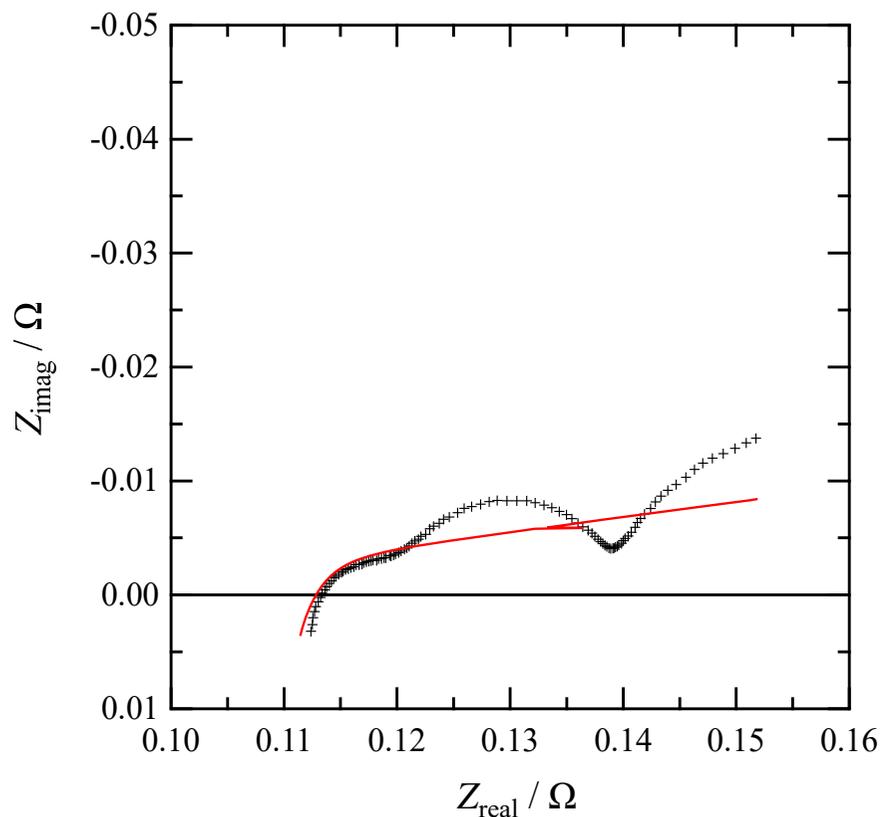
実際のデータ解析における問題3

最小自乗計算でエラー出力

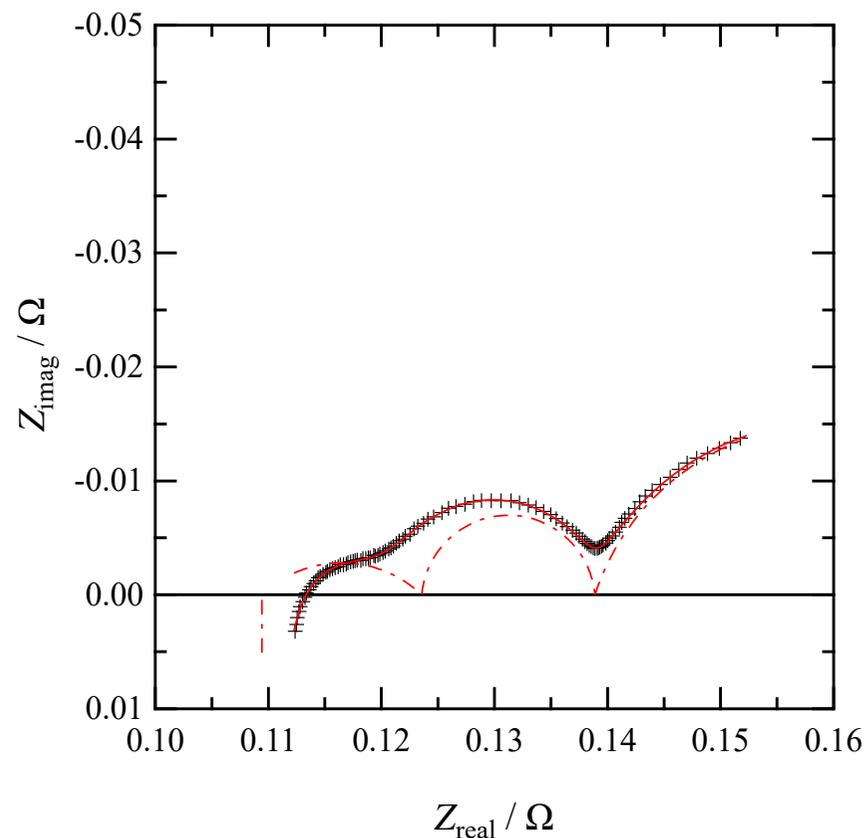
パラメータ初期値はサンプリングデータを用いて計算するため収束しやすい値を設定できます
(GUI操作なので自身で特別な計算を行う必要もありません)

オープンソースDRT解析プログラムDRTtools梱包データ(LiB_data.txt)を使用. T. H. Wan, DRTtools, URL: <https://sites.google.com/site/drtools/>

適当な初期値から計算(他商用ソフト使用)



GUIで初期値探索後



回路モデルが同じでも、解析の容易さが違います

独自機能1

簡易人工知能による自動解析



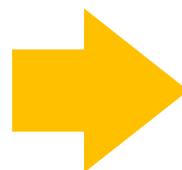
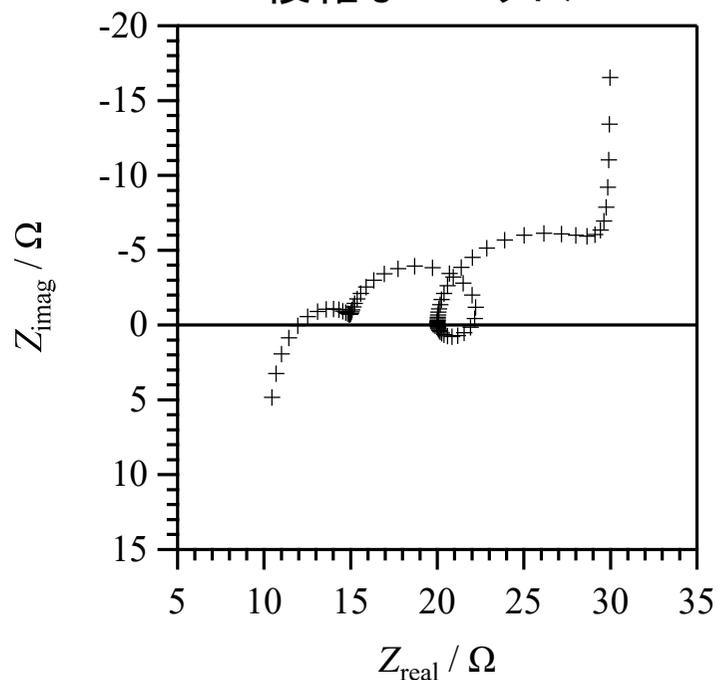
ボタンを押すだけで
自動解析

独自機能2

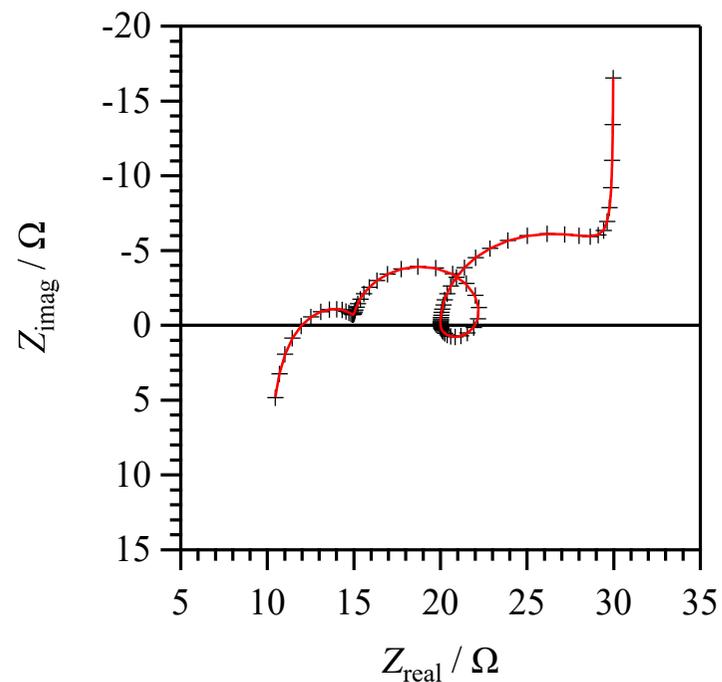
独自に拡張した緩和時間分布(DRT)解析

機械学習分野で発展したElastic Net正則化法で実装
独自に拡張したアルゴリズムにより様々なスペクトルへの適用可能

従来のDRTでは解析できない
複雑なスペクトル



拡張DRT法なら解けます



特願2018137404号

想定される用途

- インピーダンス解析を使う全分野の開発・研究者
- スペクトルを測定しているが解析でお悩みの方
- 装置にインピーダンス解析ソフトをバンドルしたい
- 新しいインピーダンス解析ソフトをリリースしたい

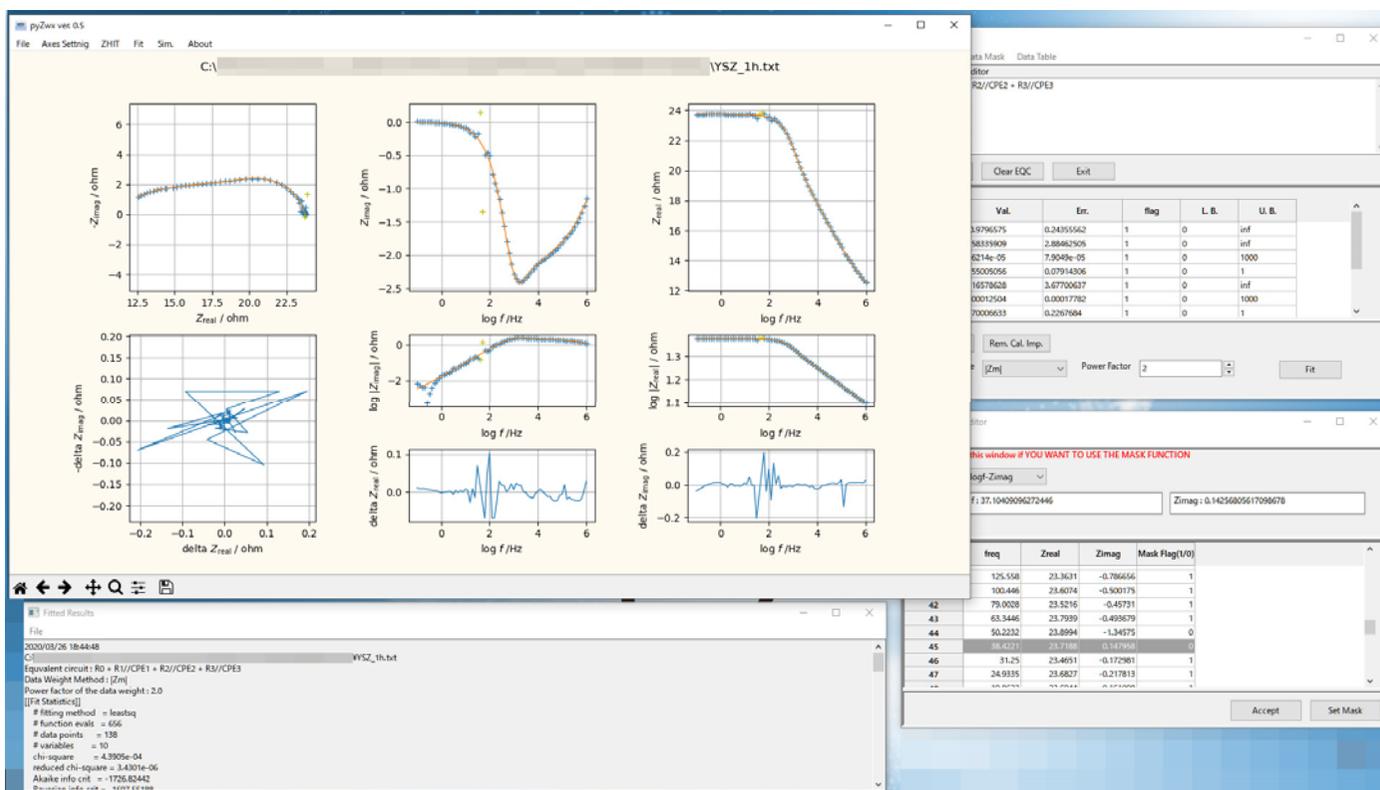


解析相談からソフトウェア機能開発までお役に立ちます

その他

- 商用ソフト上で作動するマクロ・プログラム
- 独立アプリ化

従来の解析法のみをサポートする独立アプリは開発(中)



- Pythonでコードした独立アプリ
- マルチ・プラットフォーム・コード (Windows, mac OS, Linux上で作動)
- Windows版実行形式アプリは公開準備中

企業の皆様へ

- ソフトウェアは有料ライセンスで提供できます。
- 期限付き試用版もあります。
- 使用法等について技術指導(有料)も行えます。
- 踏み込んだ解析指導については共同研究で受け付けております。



若い方が使用法と基礎を身につければ、社内の
様々な場で活躍できると思います。

本技術に関する知的財産権

- 発明の名称 : 電気化学インピーダンス測定装置、電気化学インピーダンス解析支援装置、及びそのためのプログラム
- 特許登録番号 : 特許第6562457号 (2019年)
- 出願人 : 国立研究開発法人物質・材料研究機構
- 発明者 : 小林 清

- 発明の名称 : 等価回路推定方法
- 特許出願番号 : 特開2018055402号(2018年)
- 出願人 : 国立研究開発法人物質・材料研究機構
- 発明者 : 小林 清

- 発明の名称 : インピーダンススペクトルデータを用いた解析処理方法、インピーダンススペクトルデータ解析処理システム、およびインピーダンススペクトルデータ解析プログラム
- 特許出願番号 : 特願2018137404号(2018年)
- 出願人 : 国立研究開発法人物質・材料研究機構
- 発明者 : 小林 清

お問い合わせ先

国立研究開発法人物質・材料研究機構 外部連携部門 企業連携室

企業様向け総合窓口HP（スマホ対応）

<https://technology-transfer.nims.go.jp/>



企業様向けの総合窓口です。各種お問い合わせ・ご相談などお気軽にご連絡ください。



基礎研究を社会へつなげる

こちらは、企業様向けの総合窓口です。
NIMSは技術相談、共同研究、装置利用など、
企業様の多様なご要望に対応しております。



技術指導・業務実施

研究者からアドバイスが欲しい

試料貸与

NIMSの研究試料（サンプル）を
評価してみたい

装置利用

NIMSの持つ最先端設備を使って
評価・分析を行いたい

実施許諾

特許やノウハウをライセンスしてほしい

共同研究

NIMSの研究者と一緒に研究がしたい

その他