

2023 年度年次報告書

社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出

2022 年度採択研究代表者

高山 裕貴

東北大学 国際放射光イノベーション・スマート研究センター
准教授

次世代放射光X線ナノCT 計測の確立と展開

主たる共同研究者:

矢田部 浩平 (東京農工大学 大学院工学研究院 准教授)

吉留 崇 (東北大学 大学院工学研究科 准教授)

研究成果の概要

本研究では、実使用に近い環境での、デバイス・材料等におけるナノスケール現象の可視化と特性との相関理解を目指して、次世代放射光を活用した「X 線タイコグラフィ」を基盤とする『次世代放射光 X 線ナノ CT 技術』の開発を進める。2023 年度は主に以下の項目 1-3 に取り組んだ。

1. その場観察のための画像再構成アルゴリズム開発

温度制御下や力学測定中のその場イメージングで問題となる試料の振動・ドリフトを取り扱うための振動・ドリフト推定位相回復アルゴリズムを新規に開発した。本アルゴリズムを放射線損傷抑制のためにクライオ環境下で取得した計測データに適用し、振動補正により空間分解能を拡張できることを確認した。また、低線量計測データからの画像再構成に向けて、深層学習を組み込んだ位相回復アルゴリズム PINE を開発し、照射線量を従来の 1/4 に低減することに成功した[Yamada et al., submitted]。

2. マルチスライスアプローチのための高収束性画像再構成アルゴリズム開発

マルチスライスアプローチによる試料厚み上限の緩和に向けて、高収束性画像再構成アルゴリズムの開発を進めた。まず、反復的位相回復アルゴリズムの安定性・収束性を定量評価するために similarity score を導入し、フーリエ空間での理論的解釈を与えることで、その妥当性と有効性を評価した[1]。また、局所解に留まりにくい劣勾配射影に基づく位相回復アルゴリズム CRISP を新規に開発した[2]。CRISP では劣勾配射影で問題となるハイパーパラメータとステップサイズの調整を自動化し、similarity score や Fourier ring correlation による解析から、汎用アルゴリズムである ePIE と同等の計算速度でより高い空間分解能と収束性を達成できることを示した。

3. 機械学習と物性シミュレーションを組み合わせた構造分類および物性予測

不均一な階層構造を有する対象の構造-機能相関理解に向けて、構造分類とシミュレーションによる物性予測のため機械学習解析スキームの構築に取り組んだ。多孔質試料を対象とし、試料の三次元構造に適切なデータ処理を施すことで、物性値と相関した構造分類を行うことに成功した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Takayama, Y., Nakasako, M. Similarity score for screening phase-retrieved maps in X-ray diffraction imaging – characterization in reciprocal space. *J. Synchrotron Rad.* **31**, 95-112 (2024).
- 2) Akaishi, N., Yamada, K., Yatabe, K., Takayama, Y. Subgradient-Projection-Based Stable Phase Retrieval Algorithm for X-ray Ptychography. *J. Appl. Cryst.*, *accepted*.