

村上 恭和

九州大学大学院工学研究院  
教授

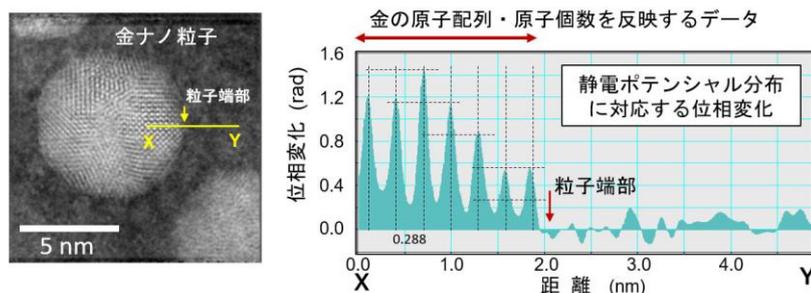
## AIと大規模画像処理による電子顕微鏡法の技術革新

### § 1. 研究成果の概要

本研究では、物質が示す電場・磁場を観測できる“電子線ホログラフィー”の感度向上を、情報科学との融合を通して実現することを目指す。研究対象としては、触媒系材料が示す電場分布や、磁性化合物における磁束分布の解明等を想定する。その研究目的を達成するために、まず、タンパク質の構造解析で成功を収めている単粒子解析の手法概念(大規模画像データを用いた必要情報の抽出)を電子線ホログラフィーに導入する。さらにウェーブレット隠れマルコフモデル(WHM)等の手法を駆使して、これまで十分な解析を実施できなかった低像質のホログラムからも位相情報を適切に抽出できる技術を開発する。

本研究では、前半期(研究開始から三年までの期間)に大規模画像取得システムや画像解析・雑音除去に関わる基盤技術を整備し、後半期に注力する物質科学の重要課題への取り組みに備える計画を立案した。これまでに、研究項目の一部は当初計画を上回るペースで進んだほか、計画全体において着実な進展を遂げている。以下に、2018年度に得られた代表的な研究成果を記す。

(1) ホログラムの自動取得システムの開発: 単粒子解析の手法概念を導入するためには、電子線ホログラムを大規模に自動収集できる技術を構築する必要がある。しかし電子線ホログラフィーの実験では、電子干渉パラメータの調整など高度な技術が必要となるため、データ収集の自動化は従来困難と考えられていた。本研究では、種々の要素技術を整備することで、その複雑な画像データ収集プロセスをほぼ完全に自動化することに成功した。1000 画像を越えるホログラムを、原子分解能を維持したまま収集できる未踏技術の開発となった。



自動取得したホログラムから位相像を再生  
 → 金ナノ粒子の静電ポテンシャル分布を“原子分解能”で解明  
 (Takahashi et al., submitted)

(2) ホログラムの雑音除去技術の開発: WHM によるホログラムの雑音除去技術を高度化した。前年度までに整備した技術に「分散安定化処理」というプロセスを導入し、像質の悪い(SN比が10以下の)ホログラムの解析精度を改善した。また、利用するウェーブレットをホログラムの特徴に応じて選択することで、一層の精度向上を実現できることを示した。これらの研究を通して、本雑音除去技術を実用化レベルに近づけることができた。

(3) 機械学習を駆使した電顕画像解析技術の整備: 前年度までに整備した画像データ(位相再生像)の認識・分類に関わる要素技術を統合し、半自動的に、効率的な解析を実施できるプロセスを整備した。また位相再生時に発生するアーティファクト成分を、本質的な位相情報と分離するためのプロセスを考案した。本年度は実触媒試料を用いた技術検証も行き、当該技術の有効性を実証する段階に至った。

(4) 原子分解能での磁場観察の実現: 物質中の磁場分布を原子分解能で観測する挑戦的研究の主要部分を、2018 年度に達成することができた。本 CREST 研究で整備した画像処理プロセス等を利用し、磁性化合物が示す反平行なスピン配列を原子レベルでイメージングすることができた。このような磁気構造の観測は、従来、中性子散乱を使った実験に頼らざるを得なかったが、電子顕微鏡によって実現できることが初めて実証された。

【代表的な原著論文】

1. Kodai Niitsu, Atsuko Sato, Taisuke Sasaki, Ryunosuke Sawada, Youngji Cho, Yukio Takada, Takashi Sato, Yuji Kaneko, Akira Kato, Tadakatsu Ohkubo, Daisuke Shindo, Kazuhiro Hono and Yasukazu Murakami, "Magnetization Measurements for Grain Boundary Phases in Ga-doped Nd-Fe-B Sintered Magnet", Journal of Alloys and

Compounds, vol. 752, pp. 220-230, 2018

2. Tetsuya Akashi, Yoshio Takahashi, Ken Harada, Toshio Onai, Yoshimasa Ono, Hiroyuki Shinada and Yasukazu Murakami, "Illumination Semi-angle of  $10^{-9}$  rad Achieved in a 1.2-MV Atomic-resolution Holography Transmission Electron Microscope", *Microscopy*, vol. 67, pp. 286-295, 2018.

3. Youngji Cho, Kodai Niitsu, Yoshihiro Midoh, Koji Nakamae, Daisuke Shindo, Jun-Mo Yang and Yasukazu Murakami, "Suppressing Geometric Phase Shift owing to Antiphase Boundaries in Dark-field Electron Holography", *Mater. Trans.*, vol. 30, pp. 698-703, 2019.

## § 2. 研究実施体制

### (1) 村上グループ

① 研究代表者：村上 恭和（九州大学大学院工学研究院 教授）

② 研究項目

【研究項目 1】 ホログラム取得の自動化

- ・ 300 kV 汎用型ホログラフィー電頭の機能整備（2018 年度実施項目）

【研究項目 2】 単粒子解析の概念に基づく位相情報の積算・平均化

- ・ ホログラム収集・解析に対する手法設計（2018 年度実施項目）

【研究項目 5】 電磁場解析に供する試料調製

- ・ 微粒子を主体とする化合物試料の調製（2018 年度実施項目）

【研究項目 6】 物質科学の重要課題の評価

- ・ 物質科学に対する本技術の適用（2018 年度実施項目）

### (2) 品田グループ

① 主たる共同研究者：品田 博之（日立製作所研究開発グループ基礎研究センター  
主管研究長）

② 研究項目

【研究項目 1】 ホログラム取得の自動化

- ・ 1.2 MV 原子分解能ホログラフィー電頭の機能整備（2018 年度実施項目）

【研究項目 2】 単粒子解析の概念に基づく位相情報の積算・平均化

- ・ AI による画像認識・処理の適用（2018 年度実施項目）

【研究項目 3】 AI を駆使した画像データ認識・処理技術の開発

- ・ 微粒子を想定した電頭画像認識・分類技術の開発（2018 年度実施項目）
- ・ 位相再生像の評価選別技術の開発（2018 年度実施項目）

【研究項目 6】 物質科学の重要課題の評価

- ・ 物質科学に対する本技術の適用（2018 年度実施項目）

### (3) 中前グループ

① 主たる共同研究者：中前 幸治（大阪大学大学院情報科学研究科 教授）

② 研究項目

【研究項目 2】 単粒子解析の概念に基づく位相情報の積算・平均化

- ・ 統計数理的技術の適用（2018 年度実施項目）

【研究項目 3】 AI を駆使した画像データ認識・処理技術の開発

- ・ 位相再生像の評価選別技術の開発（2018 年度実施項目）

【研究項目 4】 統計数理的技術を用いた位相情報抽出の高度化

- ・ ホログラムの雑音低減技術の開発（2018 年度実施項目）
- ・ ホログラムにおける情報欠損の回復技術の開発（2018 年度実施項目）