

2023 年度年次報告書

計測・解析プロセス革新のための基盤の構築

2023 年度採択研究代表者

山本 知一

九州大学 大学院工学研究院

助教

深層学習を用いた次世代電子線トモグラフィ技術の開発

## 研究成果の概要

近年、走査透過電子顕微鏡(STEM)を用いた原子分解能電子線トモグラフィーは、結晶性材料の三次元原子配列を直接的に解析する手法として注目されている。しかしながら、被写界深度の制限から対象が数ナノメートルのナノ粒子に限られ、また電子の多重散乱に伴う信号強度の変調やデータ測定範囲の制限から再構成アーティファクトが生じ、原子番号差の大きい元素種しか識別できないという課題がある。本研究では、これらの課題を克服することを目標として、被写界深度と分解能の拡張が期待される電子線タイコグラフィーおよび元素種を区別できる STEM-EDX/EELS スペクトルイメージングを用いた新しい原子分解能トモグラフィー技術を開発する。それに加えて深層学習を活用した原子画像のノイズ除去や再構成アーティファクト補正の技術を開発して再構成精度の向上を図る。

今年度は、電子顕微鏡画像の深層学習を行う上で必要となる大規模画像データセットを構築するためのコードを整備した。開発したコードでは、結晶情報の記載された CIF(Crystallographic Information File)から、さまざまなサイズおよび表面ファセットを有するナノ粒子の構造モデルを生成し、マルチスライス法により原子分解能画像の傾斜シリーズおよび電子回折図形の傾斜シリーズを自動的に計算することができる。また計算した原子分解能画像には、各種ノイズを付与した上で、深層学習の教師データとした。現在、数千枚のシミュレーション画像を蓄積しており、データの蓄積を続けている。また、電子顕微鏡画像のノイズ除去および再構成アーティファクトを補正するためのネットワーク構造として 3DUnet および Unet++を用いたニューラルネットワークを検討して、深層学習のコードについても整備を進めた。今後はこれらのデータを用いて深層学習を利用したノイズ除去および再構成アーティファクト補正技術の開発を進めるとともに実験的な検証を行う。