

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2016年度採択研究者

2018年度 実績報告書

志賀 元紀

岐阜大学工学部
准教授

物質・材料の微細構造計測におけるインフォマティクス技術の開拓

§ 1. 研究成果の概要

様々な微細構造計測法の中で、2018年度は2種類のデータ スペクトルイメージング、電子回折図形イメージング (Diffraction Imaging あるいは 4D-STEM) の解析のためのインフォーマティクス法の研究・開発に従事した。スペクトルイメージング解析法の研究課題では、多次元記述子空間における計測スペクトルの正規性 (図1) に基づき成分数を仮説検定する手法の開発に取り組んだ (国際会議 ICM19 にて口頭・ポスター発表)。また、スパースモデリングに基づく TOF-SIMS の成分同定 (国内学術雑誌 Journal of Surface Analysis にて誌上発表) を行った。これらを通じて、本研究課題で開発してきた解析手法をさらに発展させ、さらに、新しい種類のデータ解析を通じて開発手法の有効性が示された。

電子回折図形イメージングの研究課題では、結晶構造の解析法の研究に取り組んだ。結晶構造の回折図形は鋭いピークが規則的に並ぶパターンであるため、成分数が有限であれば回折パターンも有限である。注目領域を網羅計測して得た電子回折図形イメージングを行列分解することによって、計測領域中の成分を同定する手法を考案し、性能評価を行った。

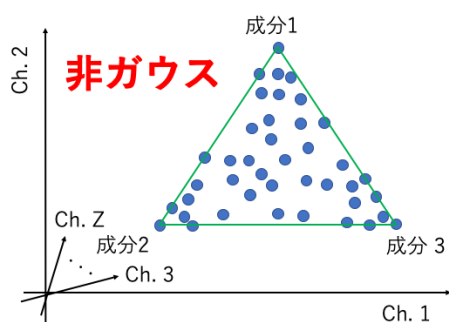
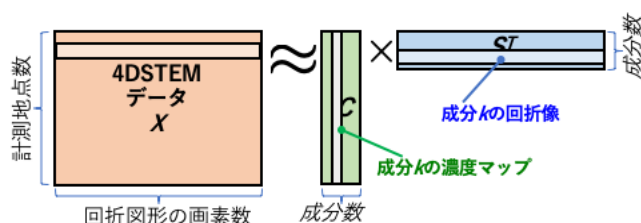


図1: ガウス性による成分数の仮説検定



2次元の回折図形を記述しベクトルとして扱うことで、行列分解が可能になる。

図2: 行列分解による電子回折図形イメージングの解析

§ 2. 研究実施体制

- ① 研究者: 志賀 元紀 (岐阜大学工学部 准教授)
- ② 研究項目
 - ・スペクトルイメージングおよび回折図形イメージングのための統計的機械学習法の開発
 - ・構造モデル生成のための計算機シミュレーション
 - ・微細構造計測データの計算機シミュレーション