



PRESS RELEASE (2021/10/27)

機械学習による世界最速の三次元電子顕微鏡ナノイメージング

私たちの日常生活を支える基盤技術として活用され始めた人工知能は、調和の取れた未来社会実現のキーテクノロジーの一つです。単純作業の自動化から、人間には困難な複雑なパターンの認識やビッグデータからの情報抽出まで、最先端研究開発の更なる加速に大きく貢献しています。

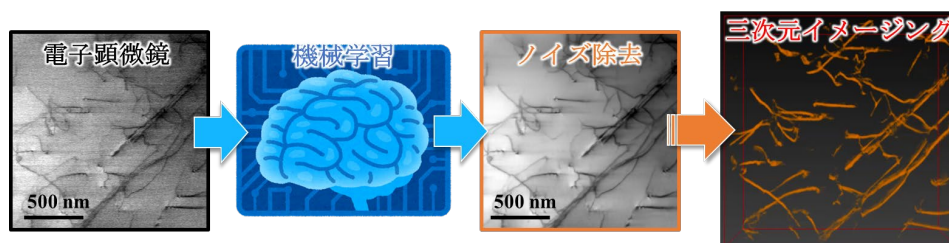
今回、九州大学先導物質化学研究所の齊藤光准教授、井原史朗助教、村山光宏教授、ならびに同大学大学院総合理工学府の趙一方氏(博士課程在学)、鯉池卓氏(修士課程修了、現在株式会社神戸製鋼所勤務)、同大学工学部の仲間陸人氏(卒業、現在株式会社リポルブ・シス勤務)、同大学院総合理工学研究院の光原昌寿准教授、波多聰教授らの研究グループは、機械学習【用語 1】を活用したノイズフィルター【用語 2】を組み込んだ新しい電子顕微鏡【用語 3】の計測手法を開発し、物体の内部をナノメートル(100 万分の 1 ミリメートル)スケールの解像度で立体的に可視化するトモグラフィー【用語 4】と呼ばれる観察技術を従来よりも 100 倍高速化することに成功しました。

本研究で用いられた立体可視化法は、医療現場で身体の断層面の画像を得るために活用されている X 線 CT【用語 5】検査と同じ原理に基づいており、いろいろな角度から撮影した試料の二次元画像から数学的規則を用いて試料の立体像を再構築します。しかしながら、ナノスケールで多数枚の二次元画像を撮影するには長時間を要します。さらに試料が厚くなると電子線が透過しにくくなるため、解像度の高い像を得るには走査透過電子顕微鏡法(STEM)【用語 6】という特殊な手法が必要となりますが、STEM の撮像速度を極限まで高めようとする、電子線の位置を制御する装置や撮影装置の特性に由来したノイズや画像の歪み、いわば「装置の癖」が画像に複雑に含まれるようになるため、STEM による画像撮影や立体可視化の高速化は難しい課題とされていました。特に、観察対象試料由来の信号とノイズとを区別する作業は人力ではほとんど不可能でしたが、今回、機械学習を取り入れた手法により克服することができました。その結果、物体の内部情報を含む立体可視化に必要な全画像をわずか 5 秒(従来は数十分)で取得する世界最速のナノイメージングを実現しました。

電子顕微鏡は物質や材料の内部の組織を詳細に可視化することができる強力な装置ですが、本開発手法により、試料の微細な変化をリアルタイムで立体的に観察することが容易になりました。構造材料の変形や化学反応等の直接観察といった研究の新たなアプローチとなることが期待されます。

本研究は、JST 戦略的創造研究推進事業 CREST(JPMJCR1994)、科学研究費補助金(JP19H02029、JP20H02479、JP18H05479、JP20H02426、JP20K21093)の支援を受け、また、米国 NSF-NNCI Virginia Tech center との共同研究(ECCS 1542100, 2025151)、株式会社マックスネット、株式会社システムインフロンティアの技術的支援を受けて実施されました。

本研究成果は 2021 年 10 月 26 日に *Scientific Reports* 誌に公開されました。



(参考図) 機械学習を活用したノイズフィルタリングの模式図と 5 秒で取得されたデータから再構築された材料内部の三次元ナノ構造。

研究者からひとこと：

本研究は機械学習を用いることで、ハードウェアの改良だけでは実現困難な課題を克服しています。このような情報技術を取り入れた研究が、学術においても今後の主流になっていくと思われます。

【研究背景】

電子顕微鏡の計測手法開発において現在最も注力されている技術の一つが、観察対象が実際に機能する様子をリアルタイムで可視化するオペランド観察です。オペランド観察では、観察対象自体とその周囲環境の両方を試料として含むため、試料全体が厚くなることは避けられません。図1に従来の透過電子顕微鏡法(TEM)の概要図を示します。TEM では観察視野全体に電子線を一様に照射し、透過電子線に含まれる試料の構造情報がレンズによって拡大され、カメラ等の記録媒体に転送されます。一方、STEM では試料上の一点に収束された電子線で試料上を走査することにより撮像されます。視野全体の情報を一度にカメラで記録できる TEM は撮像速度の面で STEM に対し有利です。しかしながら、レンズの色収差[用語 7]の影響を受けるため、TEM では厚い試料の観察時に像が著しくぼやけるという課題があり、一般に試料の厚みは 100 nm(ナノメートル)程度に制限されていました。撮影に視野全体の電子線による走査が必要とされる STEM は撮像速度の面で TEM には劣ります。しかしながら、STEM には結像レンズ系の色収差の影響による解像度低下を回避できるという利点があり、STEM は厚い試料の観察に向いています。STEM における電子線の走査を現在市販されているハードウェアの限界まで速くすると、数 10 ミリ秒の撮像速度を実現することはできません(図2に 30 ミリ秒で取得した STEM 像の例を示しています)。ただし、画像には装置および撮像条件固有の複雑なノイズ・非線形な画像歪みが含まれ、情報の定量的抽出が困難でした。速度を優先するならば従来の TEM と高速度カメラ[用語 8]の組み合わせが良いのは明らかです。しかしながら、厚い試料の観察を可能にするには、STEM を高速観察に対応できるように改良することが求められていました。

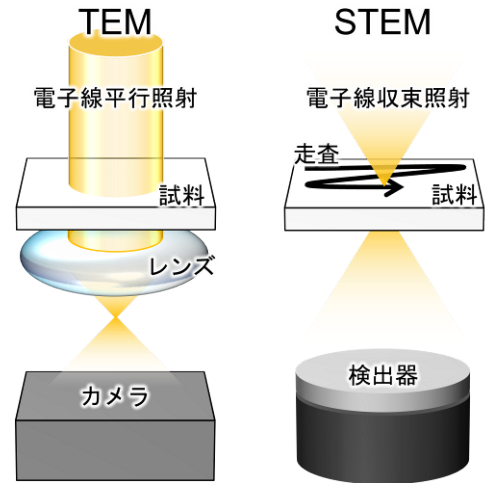


図1 TEMとSTEMの概要図。

【研究成果】

本研究で使用した電子顕微鏡の最高速度(1枚あたり30ミリ秒)でSTEM像を取得した例を図2に示します。ステンレス鋼中の転位[用語 9]が暗線として観察されていますが、電子線走査方向(紙面横方向)に信号が尾をひいたようなノイズが観察されています。このノイズは不規則ではあるものの完全にランダムではないため、モデル化が困難です。この高速走査像を同一視野から50枚取得して積算すると、ノイズを低減することは可能ですが、画像の取得に合計で数秒の時間を要してしまいます。高性能ノイズフィルターとして知られるBM3D[用語 10]を適用することで平滑な画像を得ることはできますが、50枚積算像と比較すると、ぼやけてしまっていることわかります。そこで機械学習を活用したノイズフィルターの作製を試みました。高速走査像とその50枚積算像のペアを教師データとし、高速走査像からその50枚積算像への変換をコンピュータに学ばせるこ

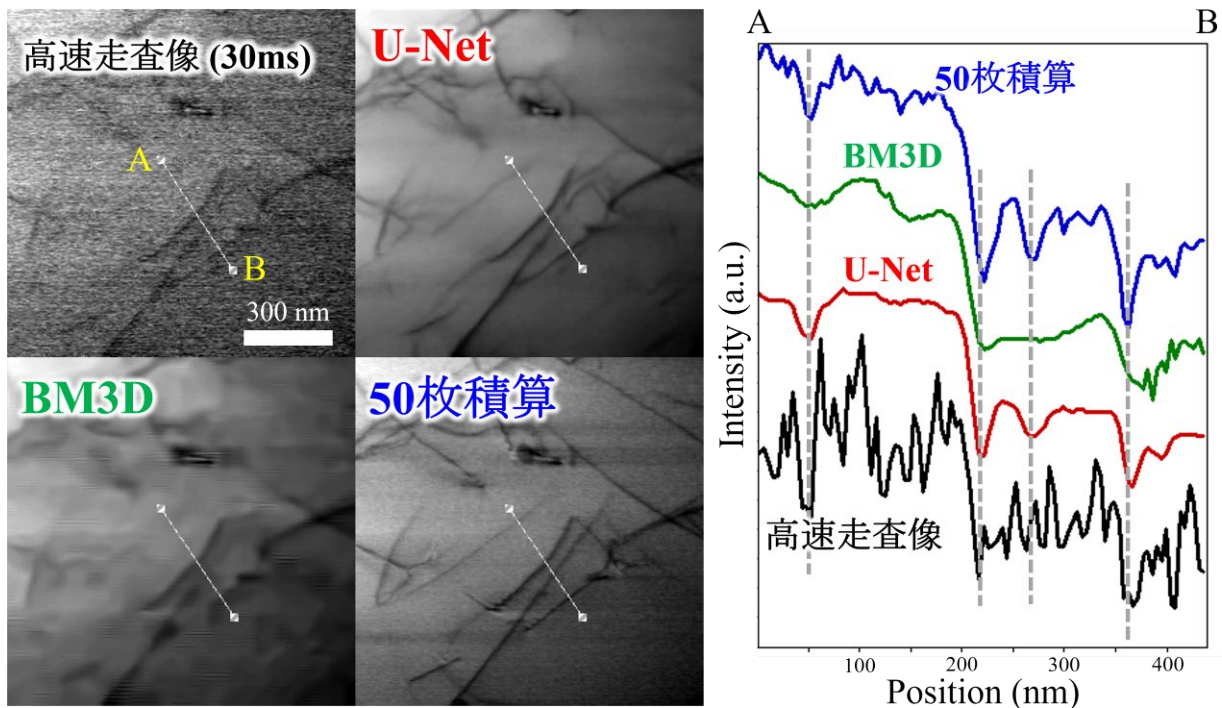


図2 ステンレス鋼中の転位の高速走査像とそれに U-Net および BM3D をそれぞれ適用した結果との比較。同一視野の高速走査像を 50 枚取得して積算した像とも比較している。

とを試みました。この機械学習では何層にもフィルターが連なった U-Net [用語 11] と呼ばれるネットワーク型のフィルターを採用し、175 種類の視野から得た合計 8750 枚の画像から構成した教師データを使用しました。結果として、機械学習ノイズフィルターが上手く機能し、1 枚あたり 30 ミリ秒の高速撮像でも数秒かけて取得したかのような低ノイズ画像が得られるようになりました。

これを立体可視化に応用した結果を図3に示しています。ステンレス鋼中の転位が立体的に交差している様子がわかります。従来、立体可視化に不可欠な連続傾斜像の取得には STEM では数 10 分の時間を要していました。開発した高速 STEM を適用することにより、連続傾斜像取得時間を 5 秒まで短縮することに成功しました。図3では本開発手法と従来手法との比較を示していますが、連続傾斜像取得時間を 5 秒まで短縮してもほとんど従来どおりの結果が得られることがわかります。今回、STEM の高速撮像が可能になったことで、より厚い試料の内部構造を立体的に高速観察できるようになりました。実際、図3では厚さ 300 nm のステンレス試料内部の転位が可視化されています。電子顕微鏡によるオペランド観察の適用範囲の大きな拡大に繋がる成果と言えます。

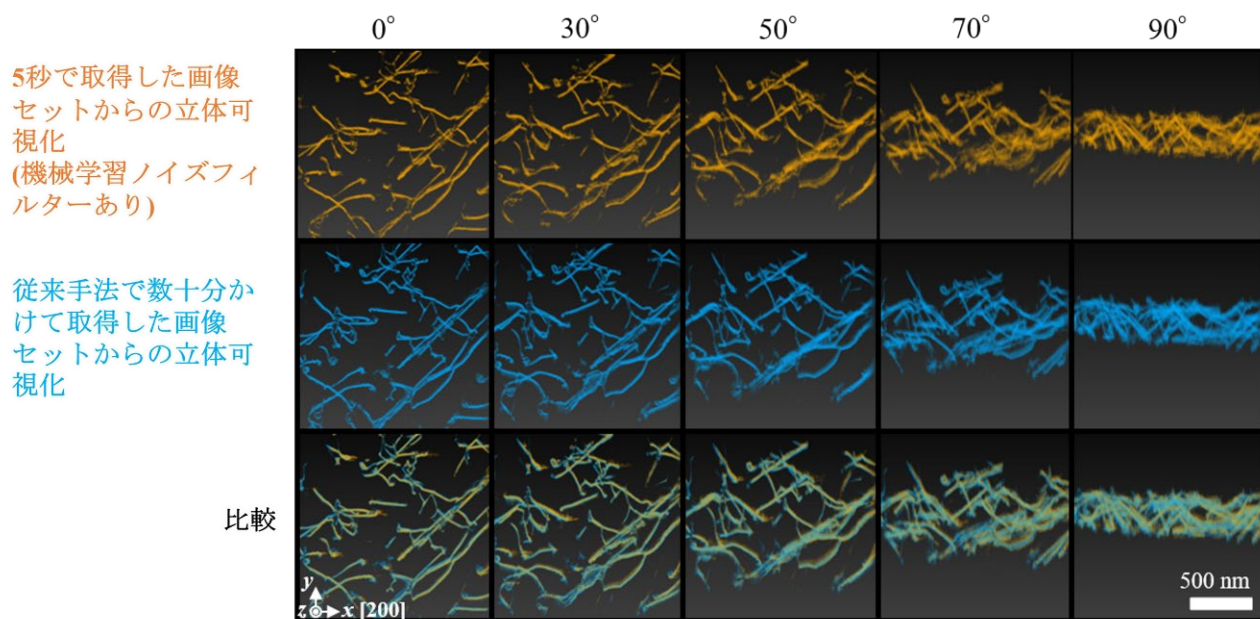


図3 機械学習ノイズフィルターを利用して 5 秒で取得された画像セットから再構成された立体像(上段)と、従来手法で数 10 分かけて取得した画像セットから再構成した立体像(中段)との比較(下段)。

【今後の展開】

豊かで安全な生活の追求、継続的な社会インフラの整備には材料開発が欠かせません。材料機能や材料合成・組織形成、さらにはその変形過程をナノスケールで直接観察することが可能になれば、マクロスケールでの挙動や特性と結びつけることが可能となり、開発速度の飛躍的な向上や新たな開発アプローチの開拓に繋がるヒントを得ることが期待できます。本開発手法はナノイメージングの高速化に有効だけでなく、試料への電子線照射量の大幅な低減、すなわち電子線に対して耐久力の低いソフトマテリアルや反応性物質、生体の電子顕微鏡解析にも応用できます。

【用語解説】

[用語 1] 機械学習：人工知能技術の一部であり、与えられたデータからコンピュータが学習を行うことで、未知のデータに対する予測を行う手法。今回は高速走査像と 50 枚積算像とで学習し、学習に用いていない連続傾斜の高速走査像から、その 50 枚積算像を予測することでノイズの除去を行っている。

[用語 2] ノイズフィルター：電気信号や情報に含まれる余分なノイズを除去する素子やプログラム。後述する電子顕微鏡も電気信号を画像(デジタル信号の二次元配列)に変換しているため、像中にノイズが反映されることがあり、観察に悪影響を与える。

[用語 3] 電子顕微鏡：高エネルギーの電子線を試料に照射し、試料による電子線の散乱等を利用して物質や生体をイメージングする顕微鏡。今日では原子の並びを直接可視化できるほど高性能(高倍率・高解像度)な電子顕微鏡が市販され、物質や生体の構造を原子レベルで解析することが可能になっている。

[用語 4] トモグラフィー：物体を様々な角度から投影して撮影した多数枚の画像を基に三次元的な立体

構造を再構成する手法。断層撮影法とも呼ぶ。

[用語 5] X線 CT：物体の透視に用いる X線によって物体の断面像を取得し、様々な角度から得られた断面像によって三次元的な立体構造を再構成する手法。CT は計算断層撮影法(Computed Tomography)の略。

[用語 6] 走査透過電子顕微鏡法(STEM)：試料を透過させる電子線を細く絞り、走査することでミクロの物体・欠陥を可視化する手法。

[用語 7] 色収差：レンズで集光した際に、光の波長(色)ごとに焦点距離が変わる現象。電子線の場合、試料内部での散乱され具合によって個々の電子が持つエネルギー、すなわち波長が変わるので、それをレンズで集光する(実際には電磁石による磁場で電子線の進行方向を曲げ、光のレンズ集光作用と同じ効果をもたらしている)と色収差が生じて像がぼやけやすくなる。走査透過電子顕微鏡法ではあらかじめ電子線をレンズで細く絞っているので、色収差は問題にならない。

[用語 8] 高速度カメラ：透過電子顕微鏡法においては電子線検出素子と信号処理方式の改良によって高速で撮像できるカメラが開発されており、その速さは現在 1 枚あたり 1 ミリ秒に及ぶ。

[用語 9] 転位：結晶内にある欠陥であり、整列した原子の並びが一部だけ線状に乱れた状態を指す。

[用語 10] BM3D：タンペレ工科大学の研究者らによって開発されたノイズ除去技術。高水準な性能を有するとして世界的に知られている。

[用語 11] U-Net：フライブルク大学の研究者らによって開発された機械学習手法。画像中の物体を識別することを得意としているが、ノイズフィルターとしても応用されている。

【論文情報】

タイトル：Five-second STEM dislocation tomography for 300 nm thick specimen assisted by deep-learning-based noise filtering

著者名：Yifang Zhao, Suguru Koike, Rikuto Nakama, Shiro Ihara, Masatoshi Mitsuhashi, Mitsuhiro Murayama, Satoshi Hata and Hikaru Saito

掲載誌：Scientific Reports

DOI：10.1038/s41598-021-99914-5

【お問合せ先】

<研究に関するお問合せ先>

九州大学 先導物質化学研究所 准教授

九州大学 情報基盤研究開発センター附属汎オミクス計測・計算科学センター 協力教員

齊藤 光

TEL: 092-583-7621 FAX: 092-583-8820

Mail: saito.hikaru.961@m.kyushu-u.ac.jp

<JST 事業に関するお問合せ先>

科学技術振興機構 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ 嶋林 ゆう子

TEL: 03-3512-3531 FAX: 03-3222-2066

Mail: crest@jst.go.jp

<報道に関するお問合せ先>

九州大学広報室

TEL: 092-802-2130 FAX: 092-802-2139

Mail: koho@jimu.kyushu-u.ac.jp

科学技術振興機構広報課

TEL: 03-5214-8404 FAX: 03-5214-8432

Mail: jstkoho@jst.go.jp