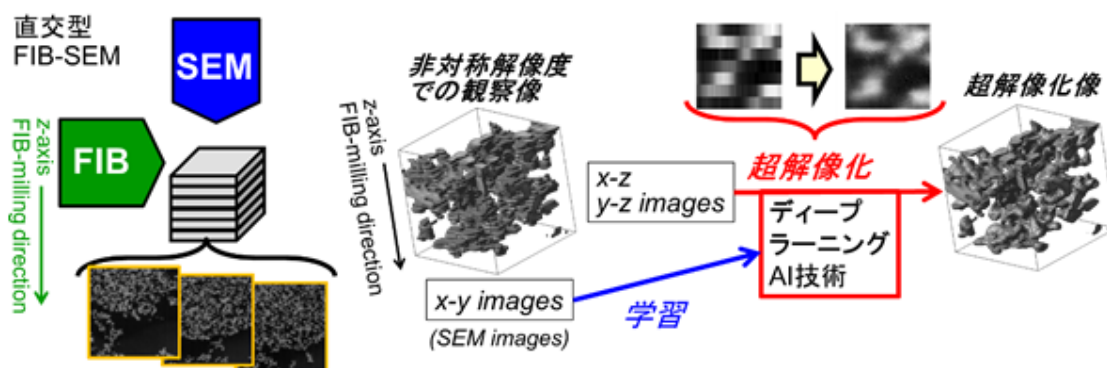


ディープラーニングなど AI 技術を活用した
超高速の 3 次元高分解能観察技術の開発に成功



【発表のポイント】

- 「非対称解像度での計測」と「AI 技術での超解像」を複合する枠組みを提案
- 「直交型 FIB-SEM」によるコンポジット中のナノ粒子構造を 2nm の解像度で計測
- 非対称解像度で計測した FIB-SEM データを情報処理で高解像度化・高速化

【概要】

国立大学法人東北大学(総長:大野 英男/以下、東北大学)多元物質科学研究所(IMRAM)の陣内 浩司教授、樋口 剛志助教と防衛大学の萩田 克美講師は共同で、従来の集束イオンビーム-走査型電子顕微鏡(FIB-SEM)^{*1}による3次元ナノ計測の分解能と計測時間を、最新のディープラーニング(DL)等の人工知能(AI)技術を用いて高解像度化・高速化する計測技術の試作に成功しました。ポリマー中に分散させたシリカ粒子の3次元凝集構造の2nmの解像度での計測を実現し、さらに、非対称低解像度計測を模擬したデータに対するDL超解像処理の試験において、試作した計測手法を実証しました。本技術により、実用上の解像度を確保しつつ計測時間を短縮するハイスループット化や、高解像度化が可能となります。今回の事例に限らず様々なソフトマテリアル^{*2}複合材料に展開可能で、今後、DLなどのAIを用いた材料開発のひとつとして期待されます。

この研究成果は、4月12日10時(英国時間)にNature Publishing Groupの電子ジャーナル Scientific Reports に掲載される予定です。

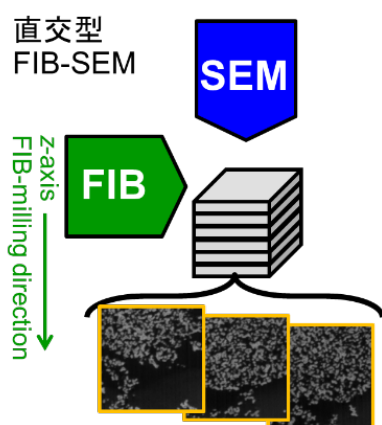
【詳細な説明】

FIB-SEM は、半導体材料や電池材料をはじめ、生物器官やソフトマテリアル複合材料の立体的な構造計測に用いられる電子顕微鏡技術です。半導体材料や電池材料の場合、イオンビームによる原子 1 つのスケールでの切削観測が可能です。しかしながら、タイヤのトレッド面(タイヤが路面と接触する部分のゴム層)や食品の包装材などに広く用いられる「ソフトマテリアル複合材料」では、イオンビームによるダメージが大きく、細かいピッチでの切削が難いため、高い解像度での材料計測の妨げとなっていました。また、FIB の切削解像度に比べて、高い解像度を取得できる SEM 像が有効に活用されていませんでした。

東北大学と防衛大学校は、共同で、超解像化処理技術で 3 次元構造計測の高速化(ハイスループット化)手法を考案し、シリカナノ粒子を充填したポリマーナノコンポジット*3 に対して、「非対称解像度で計測」した 3 次元像の画質を向上させることができることを確認しました。開発した技術の概要は以下の通りです。

1. 非対称解像度観察と超解像化処理

FIB-SEM では、FIB の切削方向(z 軸)の解像度と比較して、x-y 面の SEM 像の解像度は高く取得できるという特性を持っています。従来は、x-y 面の解像度は z 方向の低い解像度に合わせていました。今回、ディープラーニングにより、x-y 面の「元像」と「人工的に作成した劣化像」の関係性を学習させ、x-z と y-z 面の像に対して解像度を向上させる超解像化処理を実施し、3 次元ボリュームデータを構成する手法を考案しました。2 次元画像を処理の対象とすることで、他の試料の情報を用いることなく、同一の材料のデータのみでディープラーニング学習が可能となりました。



図。「直交型 FIB-SEM」の概略図。イオンビームにより材料の表面を薄く切削し、その断面を観察するという手順を繰り返すことで、3次元像を観察する電子顕微鏡技術。直交型 FIB-SEM は、FIB と SEM が直角に配置されているため、歪みのない SEM 像を取得できる。

2. 2nm 解像度での FIB-SEM 計測

ソフトマテリアルの FIB-SEM 観察では、イオンビームによる熱ダメージが大きいため、細かいピッチでの切削が難しく、これが切削方向(z 軸)と水平方向(x-y 面)の分解能に差が生じる原因となっていました(非対称解像度)。また、一般に絶縁体であるソフトマテリアルは、イオンビームの照射により静電気を帯び易いため、切削中に試料が動いてしまい(ドリフト)、均一な切削が困難という性質があります。このような欠点を

解決するため、重金属化合物である OsO₄ によりポリマー部分を固定化し、ソフトマテリアルに熱伝導性と導電性を付与することで、イオンビームに対するダメージを低減しました。その結果、従来に比べておよそ 1/10 となる 2nm のピッチでポリマーナノコンポジットを切削することに成功し、全方位に等しい分解能 (2nm) で一辺 2 μm の大体積の 3 次元ボリュームデータの計測を可能としました。

3. 超解像化処理の検証実験

今回 2nm 解像度で計測したデータを間引くことで、z 方向の解像度が低いデータセットを作成しました。これは通常のポリマーナノコンポジットの FIB-SEM による 3 次元観察に相当します。Tensorflow^{*4} を利用して SRGAN^{*5} を構成し、x-y 面の SEM 像で「劣化像」と「元像」の関係性を学習させ、x-z と y-z 面の画像を超解像化しました。z 方向の解像度が低いほど、ディープラーニングの超解像化処理が有効であることを確認しました。これにより、従来の FIB-SEM 観察よりも少ない撮影数で必要な解像度を確保できることから、3 次元ナノ構造計測のハイスループット化が期待されます。

【本研究の意義、今後への期待】

本研究成果によって、従来困難であったソフトマテリアルの高分解能 3 次元構造観察と 3 次元構造データ取得の超高速化が可能となります。条件にもよりますが、同程度の分解能の 3 次元データを 1/10 程度の時間で観察することが可能となることと期待できます。このような大量のデータを生成する電子顕微鏡技術へのディープラーニングの活用は、本研究で対象としたソフトマテリアルの研究のみならず、広範な材料における材料開発や検査工程などの広い産業応用で期待できます。

ポリマー系材料については、クライオ電顕技術の本技術への応用などにより、更なる高分解能化・高速化も期待でき、このような先進的計測技術は、東北大学(研究開発責任者:陣内浩司教授)が研究開発機関として参画している革新的研究開発プログラム (ImPACT) の伊藤プログラムで取り扱われる「しなやかなタフポリマー」の実現にも大きく資することと期待できます。

今後、東北大学は、本技術を応用した先端 3 次元電子顕微鏡の開発を民間企業 ((株)日立ハイテクノロジーズ)と共同で進め、次世代電子顕微鏡技術の発展に取り組む予定です。

【論文情報】

タイトル: Super-resolution for asymmetric resolution of FIB-SEM 3D imaging using AI with deep learning

著者: Katsumi Hagita, Takeshi Higuchi and Hiroshi Jinnai

掲載: Scientific Reports 8 号 (2018 年 4 月 12 日)

doi: 10.1038/s41598-018-24330-1

なお、本研究は以下の支援を受けて実施されました。

- ・文部科学省 科学研究費助成事業 基盤研究(A) JP16K14001 陣内 浩司(東北大学 多元物質科学研究所 教授)
- ・文部科学省 科学研究費助成事業 若手研究(A) JP16H06040 樋口 剛志(東北大学 多元物質科学研究所 助教)
- ・「物質・デバイス領域共同研究拠点」の共同研究プログラム助成
- ・文部科学省委託事業ナノテクノロジープラットフォーム課題 物質・材料研究機構微細構造解析プラットフォーム
- ・学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点、および、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (課題番号: jh160036-NAH)

【用語解説】

***1 直交型集束イオンビーム・走査型電子顕微鏡(FIB-SEM)：** 集束イオンビーム(FIB、通常はガリウムイオンビームを用いる)により材料の表面を薄く切削し、その断面を走査型電子顕微鏡(SEM)によりナノスケールで観察するという一連の手順を繰り返すことで、材料の3次元像を観察する電子顕微鏡技術。通常、装置の制約上、FIBとSEMは50度ほどの角度で設置されることが多く、SEM像は材料の断面を斜めから撮影することになる。本研究で用いたFIB-SEMは、FIBとSEMが直行する配置となっており、(斜めから撮影する際に生じる)SEM像の歪みの問題を回避することができる。

***2 ソフトマテリアル：** プラスチック、ゴム、繊維、ゲルなど、わたしたちの生活に欠かすことのできない“柔らかい”材料。

***3 ポリマーナノコンポジット：** ソフトマテリアルと金属・無機材料の複合材料。柔らかいポリマー材料中に、ナノスケールのシリカ粒子などの硬い材料を複合・分散させることで、高機能で快適で持続可能な社会の構築に貢献する材料を実現している。タイヤのトレッド面、免震ゴム、食品包装用ラップ材などに使われる。

***4 Tensorflow によるディープラーニング：** Tensorflow は、Google 社がオープンソースで開発するディープラーニング・ライブラリ。ディープラーニングとは、多層のニューラルネットワークを利用した機械学習手法です。

***5 SRGAN：** 超解像化処理のための Generative Adversarial Network。超解像化処理は、低解像度画像から高解像度画像を生成する技術です。GAN では、generator と discriminator という2つのネットワークを利用し効果的に学習する深層学習手法です。

【問合せ先】

<研究に関すること>

国立大学法人東北大学 多元物質科学研究所

高分子物理化学研究分野

教授 陣内 浩司(じんない ひろし)

電話:022-217-5329

E-mail:hiroshi.jinnai.d4@tohoku.ac.jp

<報道に関すること>

国立大学法人東北大学 多元物質科学研究所

広報情報室(担当:伊藤)

電話:022-217-5198

E-mail:press.tagen@grp.tohoku.ac.jp

防衛省 防衛大学校 総務課 社会連携推進室

電話:046-841-3810(内線 2019)