

令和 5 年 6 月 19 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2021～2022

課題番号：21K18876

研究課題名(和文)機械学習による氷表面の相転移現象の超高速原子間力顕微鏡イメージング

研究課題名(英文)Ultrafast Atomic Force Microscopy Imaging of Phase Transition Phenomena on Ice Surface by Machine Learning

研究代表者

阿部 真之(Abe, Masayuki)

大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授

研究者番号：00362666

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,900,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では氷表面における走査型プローブ顕微鏡測定(SPM)で課題であった、(1)温度変化が生じているときの熱ドリフト補正、(2)測定の高速度化、(3)SPM探針の自動調整に関して、機械学習をはじめとするソフトウェア技術によって解決した。(1)に関しては、特徴点抽出法による熱ドリフト補正方法の確立させ、最大3日間、同視野での観測を可能にした。(2)に関しては圧縮センシングを用いたデータ補完による測定高速化を行い、ハードウェアの変更なしで測定時間を1/8に短縮できることを示した。(3)においては、機械学習を用いて全自動で探針を調整する技術を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で解決した上記の走査型プローブ顕微鏡における課題は、研究者が望んでいる実験データを得るために問題となっていた。本研究によって氷表面だけでなく、様々な分野への測定に利用することで、これまで行えなかった実験研究を可能にしたことに学術的意義がある。さらに、実験研究に積極的にソフトウェアの技術を導入することで、走査型プローブ顕微鏡以外への横展開も可能になってきたといえる。

研究成果の概要(英文)：In this study, we solved the following problems in scanning probe microscopy (SPM) on ice surfaces: (1) correction of thermal drift when temperature changes, (2) speed-up of the measurement, and (3) automatic adjustment of the SPM tip, by using software technology including machine learning. For (1), we established a thermal drift correction method using the feature point extraction method, which enabled observation at the same field of view for up to three days. For (2), we have demonstrated that the measurement time can be reduced to one-eighth without hardware modification by speeding up the measurement through data completion using compressed sensing. For (3), we developed a fully automatic probe adjustment technique using machine learning.

研究分野：走査型プローブ顕微鏡

キーワード：氷表面 非接触原子間力顕微鏡 圧縮センシング 機械学習

1. 研究開始当初の背景

これまで、申請者のグループでは、温度と湿度を制御できる小型の FM-AFM (高速ではない) を試作し、融点付近における氷のイメージングを試験的に行った。その結果、氷表面のイメージングを行うことがハードウェアの制約上無理であることがわかった。熱ドリフトを考慮した大まかな計算では、擬似液体層のイメージングには、1 ms/frame の撮像時間が必要であることがわかった。原子間力顕微鏡の高速化をハードウェアだけで行うには、AFM カンチレバーやピエゾ素子の共振周波数で速度が制限され、先行研究等により 10 ms/frame の撮像時間が限界であると思われる。一方、環境を制御しながら力の距離依存性を測定することが可能であることがわかり、温度・湿度から明らかに液体層だけの場合と固体層だけの場合での F-Z カーブの振る舞いが異なることを発見した。つまり、F-Z カーブ測定という 1 点だけの測定では氷表面の相転移現象を捉えている可能性があり、氷表面の超高速イメージングが可能になれば、氷の相転移の全貌がわかるのではないかという考えにたどり着いた。現在の高速スキャナの利用だけでは走査速度が不十分であるため、機械学習を用いた熱ドリフト補正とイメージングに関してシミュレーションを行ったところ、熱ドリフトを補正しながら、走査速度を 10 倍程度改善できる可能性があることがわかった。

目標：氷の相転移現象をナノ～原子レベルで解明する

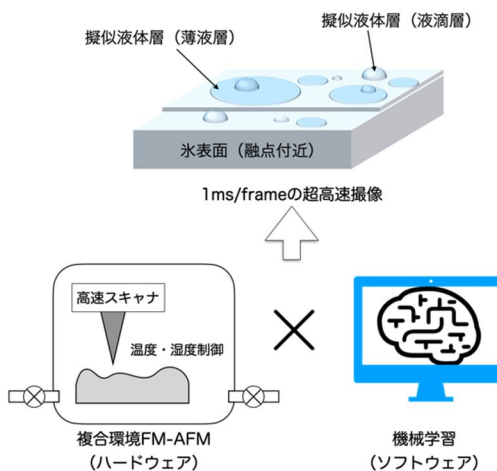


図1 本研究の目的。融点付近の氷の相転移現象を、ナノ～原子レベルで捉えるために、周波数変調原子間力顕微鏡 (FM-AFM) のハードウェアの高速化に機械学習の手法を融合させる。ハードウェアだけでは達成が困難であった高速な撮像時間を旨す。

2. 研究の目的 (図1)

高速原子間力顕微鏡のハードウェア技術と機械学習のソフトウェア技術を融合させた、撮像時間 1ms/frame の超高速時空分解能リアルタイムイメージングに挑む。具体的には、温度と水蒸気量が制御された環境で動作する原子分解能 FM-AFM を実現する。さらに、高速スキャナ (ハードウェア) の限界を超える超高速イメージングを行うために、機械学習を利用した熱ドリフト補正アルゴリズムと画像補正アルゴリズムを導入する。FM-AFM のイメージング速度の限界を追求することで、氷の相転移の特有な現象をナノレベルで高速に捉えることを旨す。

3. 研究の方法

氷の相転移をイメージングする場合の問題点は、熱ドリフトにより探針と試料の相対位置が変化するところにある。申請者は熱ドリフトを補償する技術としてアトムトラッキングの手法を考案し実施しているが、熱ドリフト速度の測定とそれに対する補償を行う必要があり、自動化したとしても、氷の表面のような熱ドリフトが非常に大きい場合は適用できない。そこで、機械学習を用いることで従来のイメージング速度を 10 倍改善することをめざした。具体的には、(a) 深層学習による熱ドリフト補償イメージングと (b) イメージ補完アルゴリズムによって撮像時間を改善させる研究を行った。

4. 研究成果

(1) 特徴点抽出法による熱ドリフト補正方法の確立 (図2)
連続した画像から特徴点のペアを抽出してマッチングさせ、プローブとサンプルの時間的なズレを計算し補正する。また、このプロトコルは、画像のコント

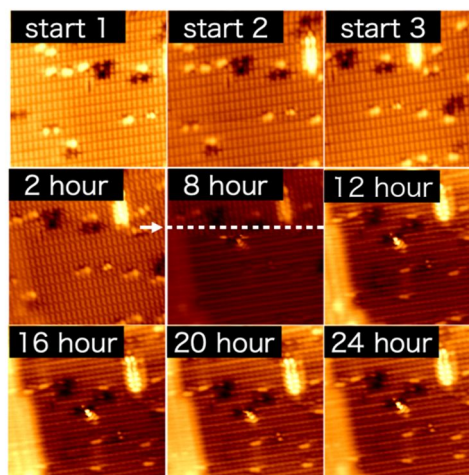


図2 Si 表面における特徴点抽出法による熱ドリフト補正。

ラストの変化に対してロバストな選択ルールを適用している。走査型プローブ顕微鏡で Si(100)表面の同じ領域を原子スケールで 25 時間、室温で連続撮影し、完全自動化を実証した。この方法は、非線形ドリフトやプローブ頂点の自然変化の存在下でも頑健であることを示した。

(2) 圧縮センシングを用いたデータ補完による測定高速化(図3)
走査型プローブ顕微鏡の画像取得において、圧縮センシングアルゴリズムを用いたデータ補完により、表面画像の測定時間を短縮した。特に、表面粗さ画像の取得点数を減らし、推定値を用いて画像を再構成することで、データ測定時間の 1/8 で表面画像を取得することが可能となった。測定時間の短縮

により、画像取得時の熱ドリフトの影響を低減できることが示されました。また、表面画像取得時に再構成が可能であることを、リアルタイムの表面画像で実証した。

(3) 機械学習を用いた探針調整法の確立

原子分解能測定において探針先端の状態を作ること、機械学習を用いて全自動で行える方法を考案した。画像パターンを学習させ、実験で取得した画像から探針先端の状態を判断できるようにした。探針先端が原子分解能に適さないと判断した時には、探針先端を試料表面にコンタクトさせ、パルス電圧を印加することで探針先端を改善させる自動化のプロセスを行えるようにした。

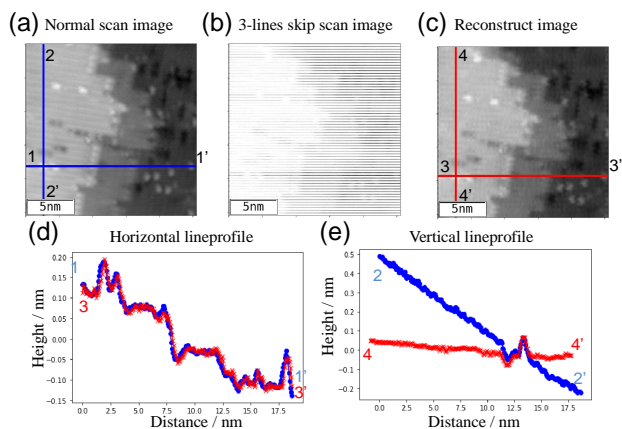


図3 圧縮センシングを用いたデータ補完。ラインプロファイルの比較より、データの再構成が正しく行われていることがわかる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 0件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Kim Kyungmin, Genchi Shingo, Yamazaki Shiro, Tanaka Hidekazu, Abe Masayuki	4. 巻 15
2. 論文標題 Crystal orientation dependence of metal insulator transition for VO ₂ microwires fabricated on TiO ₂ (110) substrates with step and terrace structures	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 045503 ~ 045503
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ac5c95	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Katsube Daiki, Ohno Shinya, Takayanagi Shuhei, Ojima Shoki, Maeda Motoyasu, Origuchi Naoki, Ogawa Arata, Ikeda Natsuki, Aoyagi Yoshihide, Kabutoya Yuito, Kyungmin Kim, Linfeng Hou, Fengxuan Li, Tsuda Yasutaka, Yoshida Hikaru, Nishi Shizuka, Sakamoto Tetsuya, Inami Eiichi, Yoshigoe Akitaka, Abe Masayuki	4. 巻 37
2. 論文標題 Oxidation of Anatase TiO ₂ (001) Surface Using Supersonic Seeded Oxygen Molecular Beam	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 12313 ~ 12317
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.1c01752	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamamura Hatsuo, Hagiwara Tatsuya, Hayashi Yuma, Osawa Kayo, Kato Hisato, Katsu Takashi, Masuda Kazufumi, Sumino Ayumi, Yamashita Hayato, Jinno Ryo, Abe Masayuki, Miyagawa Atsushi	4. 巻 6
2. 論文標題 Antibacterial Activity of Membrane-Permeabilizing Bactericidal Cyclodextrin Derivatives	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 31831 ~ 31842
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c04541	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ishihara Satoru, Sasagawa Yohei, Kameda Takeru, Yamashita Hayato, Umeda Mana, Kotomura Naoe, Abe Masayuki, Shimono Yohei, Nikaido Itoshi	4. 巻 49
2. 論文標題 Local states of chromatin compaction at transcription start sites control transcription levels	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nucleic Acids Research	6. 最初と最後の頁 8007 ~ 8023
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/nar/gkab587	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kitora Shuji, Jinno Souma, Toki Hiroshi, Abe Masayuki	4. 巻 9
2. 論文標題 A Time-Domain Numerical Method for Multi-Conductor Coaxial Lines Using the Exact Retarded Potential Integral Equations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 IEEE Access	6. 最初と最後の頁 66781 ~ 66790
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/ACCESS.2021.3076931	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計16件(うち招待講演 0件/うち国際学会 10件)

1. 発表者名 Kyungmin Kim Shingo Genchi Shiro Yamazaki Hidekazu Tanaka and Masayuki Abe
2. 発表標題 Manipulation of metal-insulator transition in V02 thin films by using step-terrace orientations of TiO2(110) substrates
3. 学会等名 The 25th SANKEN International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kyungmin Kim Shingo Genchi Shiro Yamazaki Hidekazu Tanaka and Masayuki Abe
2. 発表標題 Manipulation of metal-insulator transition in V02 thin films by using step-terrace orientations of TiO2(110) substrates
3. 学会等名 The 13th International Workshop on Oxide Surfaces: IWOX-XIII (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金 庚民、玄地 真悟、山崎 詩郎、田中 秀和、阿部 真之
2. 発表標題 TiO2(110)ステップ基板上V02薄膜の相転移特性の素子方向依存性
3. 学会等名 第69回応用物理春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 勝部大樹、大野真也、高柳周平、尾島章輝、前田元康、折口直紀、小川新、池田夏紀、青_良英、甲谷唯人、Kim Kyungmin、侯林楓、李豊、津田泰孝、吉田光、西静佳、坂本徹哉、稲見栄一、吉越章隆、阿部真之
2. 発表標題 超音速分子線を照射したアナターゼ型TiO ₂ (001)表面のX線光電子分光による評価
3. 学会等名 第69回応用物理春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Kim S. Yamazaki Daiki Katsube Hayato Yamashita and Masayuki Abe
2. 発表標題 Atom switch by STM current on SrTiO ₃ (100)-(13 × 13) surfaces
3. 学会等名 International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices ' 21 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金 庚民、山崎 詩郎、勝部 大樹、山下 隼人、 阿部 真之
2. 発表標題 STM の電流による SrTiO ₃ (100)- 13× 13 表面上の原子スイッチ
3. 学会等名 2021年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Kim S. Yamazaki D. Katsube H. Yamashita and M. Abe
2. 発表標題 Atom switch by STM current on SrTiO ₃ (100)- 13× 13 surfaces
3. 学会等名 29th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM29) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金 庚民、玄地 真悟、山崎 詩郎、田中 秀和、阿部 真之
2. 発表標題 TiO ₂ (110)STEP基板上VO ₂ 薄膜の素子方向制御による金属-絶縁体相転移特性変化の発見
3. 学会等名 第4回日本表面真空学会若手部会研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 L. Hou T. Ishibe D. Katsube Y. Nakamura H. Yamashita and M. Abe
2. 発表標題 STM Study of Thin Film Growth of SnO ₂ by Pulsed Laser Deposition
3. 学会等名 29th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM29) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 D. Katsube S. Ohno S. Takayanagi S. Ojima M. Maeda N. Origuchi A. Ogawa N. Ikeda Y. Aoyagi Y. Kabutoya K. Kim L. Hou F. Li Y. Tsuda H. Yoshida S. Nishi T. Sakamoto E. Inami A. Yoshigoe and M. Abe
2. 発表標題 X-ray photoelectron spectroscopy study of anatase TiO ₂ (001) using oxygen supersonic seeded molecular beam
3. 学会等名 International Symposium on Surface Science 9 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 L. Hou T. Ishibe D. Katsube Y. Nakamura H. Yamashita M. Abe
2. 発表標題 STM study of SnO ₂ thin film fabricated by PLD at high temperature
3. 学会等名 13th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '21(ALC '21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Kim S. Yamazaki D. Katsube H. Yamashita Masayuki Abe
2. 発表標題 Atom switch by STM current on SrTiO ₃ (100)-(13 × 13) surfaces
3. 学会等名 13th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices ' 21(ALC ' 21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Kyomoto Y. Miyato H. Yamashita and M. Abe
2. 発表標題 Humidity-Controlled Atomic Force Microscopy Introducing High Speed Scanner
3. 学会等名 13th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices ' 21(ALC ' 21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Ueda Z. Diao H. Yamashita and M. Abe
2. 発表標題 Under-sampled imaging method of scanning tunneling microscopy with compressed sensing algorithm
3. 学会等名 Under-sampled imaging method of scanning tunneling microscopy with compressed sensing algorithm (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 天木里奈、山下隼人、勝部大樹、稲見栄一、阿部真之
2. 発表標題 高速原子間力顕微鏡による光触媒材料上における脂質混合膜の分解過程の研究
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋季第169回講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 勝部大樹、大野真也、高柳周平、尾島章輝、前田元康、折口直紀、小川新、池田夏紀、青_良英、甲谷唯人、Kim Kyunming、侯林楓、李豊 、津田泰孝、吉田光、西静佳、坂本徹哉、稲見栄一、吉越章隆、阿部真之
2. 発表標題 超音速酸素分子線を照射したアナターゼ型TiO ₂ (001)表面のX線光電子分光測定
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋季第169回講演大会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------