

安全保障技術研究推進制度 令和6年度終了課題 終了評価結果

1. 評価対象研究課題

- (1) 研究課題名：AI 的画像解析によるオペランド電子顕微鏡計測技術に関する研究
- (2) 研究代表者：ファインセラミックスセンター 平山 司
- (3) 研究期間：令和2年度～令和6年度

2. 終了評価の実施概要

日時：令和7年10月16日

場所：TKP新橋カンファレンスセンター

評価委員：未来工学研究所 理事長、上席研究員

東京大学 名誉教授

平澤 洽（委員長）

リモート・センシング技術センター 理事

岩野 和生

理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター長

上田 修功

情報セキュリティ大学院大学 研究科長・教授

大久保 隆夫

玉川大学 名誉教授

大森 隆司

東京科学大学 工学院 電気電子系 教授

梶川 浩太郎

東京工業大学（現 東京科学大学） 名誉教授

佐藤 誠

兵庫県立大学大学院 情報科学研究科 教授

田中 俊昭

千葉商科大学 特定教授

筑波大学 名誉教授

東京工業大学（現 東京科学大学） 名誉教授

寺野 隆雄

札幌市立大学 理事長、学長

中島 秀之

山口大学 大学院創成科学研究科 教授

西井 淳

産業技術総合研究所 人間社会拡張研究部門 上級主任研究員

長谷川 良平

福井工業大学 経営情報学部長・主任教授
大阪大学 名誉教授・特任教授
馬場口 登

(委員長以外は五十音順・敬称略)

3. 研究と成果の概要

研究の概要

電子顕微鏡で高速の動画を撮影する時、1 画像 (frame) あたりに検出する電子数が少なくなる。そのため、いかに高性能な電子銃・レンズ・検出器などを使用しても、像が不鮮明になる。この「量子ノイズ」の問題を、スパースコーディングや3次元テンソル分解法などの AI (Artificial Intelligence) 的画像解析技術を駆使することによって解決し、超高速動画観察技術を確立することが本研究の目的であった。この新規な手法、いわゆる電子顕微鏡を用いた計測インフォマティクスを用いて、触媒や電池の原子・イオンの高速な動きを直接観察し、この観察手法が有効であることを実証した。また、本研究の AI 的画像解析が、電子線照射に弱い生物試料の観察にも有効であることも実証した。

成果の概要

開発した手法を用いて、最高で 1 秒間に 3858 frame の触媒粒子の原子分解能超高速電子顕微鏡動画観察を行い、従来は観察されたことのなかった触媒表面における原子の高速振動などの興味深い現象を発見した (電子顕微鏡の連続動画の時間分解能としては世界最高記録)。また、エネルギー分散型 X 線分光法 (Energy Dispersive X-ray Spectroscopy (EDS)) ^{*1} や電子エネルギー損失分光法 (Electron Energy-Loss Spectroscopy (EELS)) ^{*2} など、電子顕微鏡に付属する分析手法と AI 的画像解析法を用いて、原子やイオンの動きを 1 秒間に 1 frame の時間分解能で動的観察することに成功した。従来、1 枚の鮮明な画像を得るために、1 分～数分の露光時間が必要であったため、この時間分解能の大幅な向上は大きな進歩となった。特に、リチウムイオン電池の内部で、充放電中におけるリチウム分布の変化やそれに伴う遷移元素の電子状態 (価数) の変化を、時間分解能 1 秒の動画でオペランド観察できたのは世界初である。加えて、信号の弱い酸素の電子状態の変化も同様の時間分解能でオペランド観察できたことは、本研究計画当初の予想を超えた成果である。今後、電池内部における電気化学反応の解明や優れた電池開発への指針を生む解析手法として大いに期待できる。さらに、生物試料を、生体活性を持った状態で電子顕微鏡観察することにも成功し、本研究の画像解析法がここでも有効であることを示した。

4. 終了評価の評点

A A 想定以上の成果をあげた。

5. 総合コメント

世界初など世界レベルの計測技術を達成したことは高く評価される。

先端電子顕微鏡と AI 的画像解析を融合し、原子構造と機能の関係を高精度に解明する枠組みを確立した。AI 的画像解析が構造理解を加速し、データ駆動型材料科学の基盤を築いた点で高く評価される。当初の目標の多くは達成しており、十分な成果が得られている。今後、この技術が AI/機械学習分野など様々な分野に展開され、新しい知見が出てくることを期待する。

本成果を用い原子・イオンの動きに関する観察手法が有効であることを実証し、本装置を用いた研究の発展性を示した点、多数の学会発表や受賞などを踏まえ、顕著な成果と判断する。

今後は、拡散モデルなどの生成型 AI を導入し、観測限界を超えた構造予測や欠損データ補完を実現することで、より包括的な知識抽出と材料設計への展開が期待される。

究極の目標とそれを達成するための技術革新（ソフトウェア、ハードウェア、アーキテクチャなど）の見通しとロードマップを議論することが望ましい。

6. 評価の観点ごとの評価結果と個々の委員によるコメント

6-1. 研究開始時に設定した研究目標の達成度（主題的成果）

【最終目標（1）】超高速オペランド TEM 計測技術の実現と材料分野への応用（off-line）

本研究で高度化した AI 的画像解析技術（3D テンソル分解法またはスパースコーディング）を用いて、電子直接検出型カメラを搭載した透過型電子顕微鏡（Transmission Electron Microscope (TEM)）^{*3} で撮影／保存した 1 frame 毎の S/N 比を大幅に改善し、1500 fps (frames per second) の時間分解能：0.67 ms を持つ超高速オペランド TEM 計測技術の実現を目指すという最終目標に対して、最大 3858 fps の原子分解能超高速動画観察を実現し、目標をはるかに超える成果を得た。また、蓄電池材料や触媒を 1500 fps 以上の時間分解能で高速に観察し、表面原子の高速な動きやイオン拡散の状態など、大変興味深い現象を捉えることができた。

【最終目標（2）】超高速リアルタイムオペランド TEM 計測システムの実現（on-line）

最先端の TEM と高速並列演算が可能な GPU (Graphics Processing Unit) ^{*4} クラスタ計算機^{*5} を、AI 的画像解析ソフトウェアを介して有機的に連動させるシステム

を世界初で構築し（特許出願）、AI 的画像解析処理した高画質な像を、瞬時にオンラインリアルタイムで表示する機能を持つ超高速リアルタイムオペランド TEM 計測システムの実現を目指した。最終目標 1000 fps の時間分解能：1 ms を目指したのに対し、結果は最大 759 fps に留まり目標値に未達であったが、この値は世界最高の時間分解能である。最終目標の 1000 fps を達成するための課題は具体的に明らかにした。また、この時間分解能で触媒材料のリアルタイム観察を行った。

【最終目標（3）】高速原子分解能リアルタイムオペランド STEM 計測システムの実現と応用計測

走査透過型電子顕微鏡(Scanning Transmission Electron Microscope (STEM))*⁶の入射電子線プローブを高速スキャンさせ(STEM の機能)、原子構造像の動画を高速に AI 的画像解析処理し、最終目標としてテレビのフレームレートと同程度の約 30 fps の時間分解能：33 ms で、かつ、リアルタイムに表示できる計測システムの実現を目指した。その結果、31 fps で触媒や電池の観察を実現し、目標を十分に達成した。

【最終目標（4）】超高感度オペランド STEM-EDS 元素分布計測技術の実現と応用計測

超高感度エネルギー分散型 X 線分光法 (Energy Dispersive X-ray Spectroscopy (EDS)) を用いて、原子分解能で元素の移動を動画として捉えられるオペランド元素分布計測の実現を目指した。最終目標は、1 fps の時間分解能：1 s で、一旦撮影／保存された元素マッピング像の動画を AI 的画像解析処理し、上記の時間分解能で元素の移動を捉えることができる計測技術の確立を目指すこととした。その結果、触媒材料の原子の動き（結晶構造の崩壊）を 1.2 fps で観察することができ、目標を十分達成した。

【最終目標（5）】超高感度オペランド STEM-EELS 軽元素計測技術の実現と応用計測

超高感度電子エネルギー損失分光法 (Electron Energy-Loss Spectroscopy (EELS)) を用いて、蓄電池（全固体電池など）の電極内部のイオン移動過程、たとえば、リチウムなどの軽元素の移動や電気化学反応に伴う遷移元素の価数変化などを動画として捉えられる計測を実現することを目指した。一旦撮影／保存された EELS スペクトルから得られた軽元素の分布や価数分布に、AI 的画像解析処理を施し、最終目標として 1 fps の時間分解能：1 s でオペランド STEM-EELS 計測ができる技術の確立を目指した。その結果、リチウムイオン電池内部のリチウムイオンの動きや、遷移元素・酸素などの電子状態の変化が 1.2 fps の時間分解能で非常に鮮明な動画として得られた。特に信号の弱い酸素の電子状態の変化を 1.2 fps の動画で観察できたことは、当初想定していなかった結果であり、最終目標を超える成果を得た。

【最終目標（6）】ライフサイエンスのための超低侵襲電子顕微鏡計測技術の実現

生体細胞または生体分子（タンパク質など）を、生体活性を持った状態でその場観察できる機能を持つ超低侵襲電子顕微鏡計測システムの実現を目指した。急速凍結法により、生体活性を持った状態で試料を観察することができ、さらに、クマムシやコナダニなどの微小生物が動き回る様子も動画観察することができ、目標を十分に達成した。

【個々の委員によるコメント】（主題的成果）

- ・研究目標の多くは達成し、未達成の部分もその原因がわかっていることから近く達成の見通しである。超高速・耐ノイズの電子顕微鏡により、多くの現象の解明・理解が実現されている。
- ・多くの目標に対して十分な成果を得ており、3項目については世界初のスペックを実現している。
- ・リアルタイムかつ高精度で観察可能なオペランド型電子顕微鏡技術の開発で非常に優れた成果を多数出されており、一部未達成項目があるとしても総合的には素晴らしい達成度だと思われる。
- ・研究目標はほぼ達成されており、十分な成果が得られている。ただし、生体試料の観察の項目は光学顕微鏡観察を超えておらず、この手法のポテンシャルを十分に活かしているとは言い難い。

6-2. 計画時に想定していなかった成果（副次的成果）

上記の【最終目標（1）】で記述した通り、1500 fps の時間分解能：0.67 ms を持つ超高速オペランド TEM 計測技術の実現を目指すという最終目標に対し、最大 3858 fps の原子分解能超高速動画観察を実現して目標をはるかに超える成果を得た。この成果は、①1500 fps という値は、装置（電子顕微鏡用高速撮影カメラ）のスペックであるが、使い方（使用する画素数などの設定条件）によってはさらに高速動作することを見出したこと、②度重なる画像解析技術の改良によってより高速で画質の優れた像を得られるようになったこと、の2つの理由による。

また、【最終目標（5）】に記述したとおり、リチウムイオン電池内部のリチウムイオンの動きや、遷移元素の価数変化が 1.2 fps の時間分解能で非常に鮮明な動画として得られたことに加えて、信号の弱い酸素の電子状態の変化を 1.2 fps の動画で観察できた。このことは電池内の電気化学反応を完全に理解する上で非常に重要な進歩であり、当初想定していなかった最終目標を超える成果である。

【個々の委員によるコメント】（副次的成果）

- ・高分解能観察の過程で、界面近傍における原子拡散挙動や局所的イオン分布の変

化を新たに可視化し、従来モデルでは説明できなかった構造緩和機構を発見した。これにより、欠陥構造が材料特性に与える影響を定量的に評価する新たな手法を確立した。

6-3. 他の者により派生した成果（間接的成果）

（独）物質材料研究機構（NIMS）の土屋氏らの研究グループは、「スピン波（磁気の波）とイオン制御技術を組み合わせて次世代の AI デバイスを開発することに成功した（2024. 11. 24 プレスリリース）」。

この研究では、磁性体（イットリウム鉄ガーネット）に水素イオン（プロトン）を挿入し、Fe 原子のスピン波を制御することが重要となる。今回、土屋氏と連携し、本研究で開発した高感度電子エネルギー損失分光法（EELS）を用いて、磁性体に含まれる Fe イオンの価数測定を行った。その結果、プロトンを挿入することで Fe の電子状態を意図的に変化させることが可能であることを実証した。

【個々の委員によるコメント】（間接的成果）

- ・本研究で確立した高分解能解析手法やデータ解析手法が、他研究機関に波及し、触媒材料や電子デバイス材料の構造解析研究に応用された。その結果、異分野における材料機能発現メカニズムの理解が進展し、新たな共同研究の展開につながった。
- ・多くの外部有識者との連携をしていることは高く評価できる。

6-4. 科学技術上特筆すべき成果

研究成果の口頭発表のうち、招待講演が 7 件（国内会議 2 件、国際会議 5 件）あった。本研究の成果に、高い関心を持って頂いた結果である。また、本研究の成果を含む受賞が 7 件あった。本研究の「質」を評価して頂いた結果と言える。

【個々の委員によるコメント】（科学技術上特筆すべき成果）

- ・原子レベルでの構造・欠陥解析を実現し、セラミックス材料の機能発現機構を解明。先端計測技術を融合した新たな構造科学の枠組みを創出した点が特筆される。
- ・比較的平易な方法により効果的な電子顕微鏡画像のノイズ処理ができることを示した点、さらに高速な計算サーバの構築により高速処理が可能であることを示した点が評価できる。
- ・同程度の時間解像度の既存技術と比べて、解像度の高さは抜きんでている。
- ・実時間で動作する顕微鏡映像システムは、今後、材料（金属、半導体、生体）解析に多くの寄与をなすであろう。

6-5. 論文（投稿中のものも含む），学会発表等

学術論文 11件 学会発表 38件

6-6. 特許（出願中のものも含む）

出願中： 国内1件

【個々の委員によるコメント】（論文、特許、学会発表等の研究成果）

- ・イオン分布解析および電子顕微鏡による欠陥構造研究の成果を国内外の学術誌に発表し、高い評価を得た。さらに国際会議や専門学会で成果を報告し、材料構造科学分野の研究者との連携が拡大。
- ・装置の技術的な論文よりは、装置を利用した計測の成果についての論文・発表が多くあり、その有用性が示されている。
- ・多くの論文発表、学会発表を行っており、成果に対する表彰も6件あることから、十分な成果発表をしていると判断する。
- ・一件の特許申請を行っている。本研究により開発した技術を活用した応用研究でのさらなる特許取得を期待する。
- ・論文発表に対してやや特許件数が少ない感じがする。

6-7. 科学技術への波及効果

本研究で開発した「超高速電子顕微鏡連続動画観察+AI 的画像解析」の技術は、今後電池・触媒・半導体など先端技術における原子・イオンの動的観察、機能解析、設計指針策定に非常に有効であり、大学や研究機関内の研究だけでなく、企業内での製品開発や品質管理・不良解析などにも役立つと考えられる。

また、本研究課題で開発したAI 的画像解析技術は、電子顕微鏡像の解析に限らず、あらゆる画像データの解析・鮮明化に役立てることができる。たとえば、X線、中性子線、放射光、原子間力顕微鏡（AFM）の高速化、画像鮮明化や、検出する信号が極めて弱い宇宙や惑星（小惑星を含む）を研究する計測技術、衛星写真や防犯カメラ映像の鮮明化など幅広い分野に役立つと考えられる。

【個々の委員によるコメント】（発展性と波及効果）

- ・今後、適用分野を開拓していくと大いなる発展が期待できる。一方で、測定法としてもまだ改善の余地がある。
- ・確立した解析技術は、触媒・電子材料など多分野への応用が可能であり、産学連携による新材料開発や高機能化に寄与するなど、波及効果と発展性が極めて高い。
- ・この装置が普及、あるいは共同利用のような体制が実現できると、波及効果が期待できる。
- ・本成果は、半導体など先端技術における原子・イオンの動的観察に限らず、他方面

での画像解析への適用が可能であり、波及効果は大きい。

- ・真空状態での観察を基本とする電子顕微鏡観察においても特殊な溶液との組み合わせによって、生体现象の観察も可能であることが示されていて、興味深い。

6-8. 効率的な研究実施体制とマネジメント

まず、計画した研究の目標達成のため、不足している人的能力を補う必要があった。企業の電池開発部署で勤務経験のある人材を当研究所の正職員として採用し、本プロジェクトに参加させた。また、生物試料の電子顕微鏡観察のために、生物系研究の経験が豊富な人材を人材派遣会社から派遣してもらい、参加登録した。これらのマネジメントがなければおそらく研究最終目標の半分程度は達成できなかったであろうと推測される。

また、本研究においては外部の機関（大学および公的研究機関）とも強い連携体制を作って研究を実施した。特に、電池や触媒の分野においては外部機関から先端的な研究サンプルを提供いただき、本研究として電子顕微鏡解析を行い、観察解析結果を合同で議論考察することを頻繁に行った。これによっていくつかの興味深い現象を発見し、学会発表や論文投稿にも繋がった。

プロジェクト実施中、おおよそ月に一回のペースで参加登録者がほぼ全員参加する「プロジェクト全体ミーティング」を開催した。このミーティングは、研究代表者が本研究プロジェクト全体の研究進捗を把握し、プロジェクト参加職員が相互の意見交換をするために非常に効果的であった。

【個々の委員によるコメント】（効率的な研究実施体制とマネジメント）

- ・電子顕微鏡の専門分野に限られた陣容であった。課題の質から考えると適正であった。
- ・定期的な進捗会議と情報共有により課題を迅速に把握・解決し、機関内外の専門家との連携を強化。分析装置の共同利用で研究効率を高め、計画的に成果を創出した。
- ・適切と判断。ただ AI や並列処理の専門家が入った方が、よりよい成果が出た可能性はある。

6-9. 研究推進時に生じた問題への対応

本研究を開始した令和2年（2020年）当時、防衛省関係のプロジェクトへの参加を渋る企業や大学が多く、画像解析・触媒観察・生物系試料観察などで正式に協力してもらえる機関（人材）を見つけるのに大変苦労した。そこで、正式な共同研究体制にはせずに、実質的には協力していただくような形で研究を実施した。プロジェクト後半の時期には次第に制限を緩める機関が増え、より多くの協力体制を整えることができた。

本研究の前半期には、新型コロナ感染拡大の時期と重なり、他機関への訪問や他機関からの訪問が十分できず、情報収集や意見交換に苦慮した。そのため、リモート会議などを使わざるを得ず、不自由な環境ではあったが、後半期は制約が少なくなり、結果的にはほぼ挽回できた。

また、コロナの影響でもあると思われるが、前半期には半導体不足によって、電子顕微鏡用の高速カメラの納期が遅れた。中間評価の約1ヶ月前に納入されたため、中間評価を達成できない懸念があったが、懸命な実験の実施によって、中間目標をクリアすることができた。

【個々の委員によるコメント】（研究推進時に生じた問題への対応）

- ・装置トラブルや解析遅延に対しては、代替装置の活用や測定条件の最適化で迅速に対応した。
- ・ほかのAI的手法の活用や計算処理の高速化については、外部有識者との連携によって更に検討の余地はあったように思われる

6-10. 経費の効率的な執行

上記の「6-8」で記載したプロジェクトミーティングで重要な研究設備の仕様等について十分な議論を行い、研究途中で生じた技術的問題などを全員で議論することによって、プロジェクト全体を適切に運営制御し、研究経費も効率的に執行できた。年度途中で予期しない状況が生じ、新たな研究設備が必要になったことが2度あったが、いずれも認められている予算流用の範囲内で対応できた。

また、本研究で導入した電子顕微鏡を他の防衛装備庁プロジェクト（「熱制御の高度化による革新的遮熱コーティングシステムの基盤構築」（タイプA、R3～R5、研究代表者：北岡諭）、「光学特性を制御した革新的遮熱・環境遮蔽システムの基盤構築」（タイプS、R6～R10、研究代表者：北岡諭））の研究にも活用し、ハイエントロピー材料の結晶構造解析などに役立てた。

【個々の委員によるコメント】（経費の効率的な執行）

- ・高額機器の共同利用や試料作製の外部委託化によりコストを削減。旅費や消耗品費も必要最小限に抑え、研究効果を最大化する効率的な経費執行を実現した。

*1 エネルギー分散型X線分光法（Energy Dispersive X-ray Spectroscopy: EDS）：
一般に、試料に電子が照射されると蛍光X線が発生する。その中には、元素固有の情報を持った特性X線が含まれており、それをエネルギー分散型検出器で検出、分光することによって、元素分布を定量的に画像化することができる電子顕微鏡手法である。

*2 電子エネルギー損失分光法（Electron Energy-Loss Spectroscopy: EELS）：入射電子が試料を透過する際、元素の種類や原子周辺の電子の状態によって、入射電子が失うエネルギーが異なる。そのエネルギー損失の分布（電子エネルギー損失スペクトル）を用いて、元素の種類や電子状態（価数など）を計測する分析電子顕微鏡法である。リチウムのような軽元素を

検出するのに有効な観察技術である。

- *3 透過型電子顕微鏡 (Transmission Electron Microscope: TEM) : 数 100 nm 以下に薄片化した試料に、加速電圧 200~300 kV の電子線を平行に照射し、多段の電子レンズを用いて数十万~百万倍程度に拡大できる顕微鏡である。原子分解能を持ち、高速な観察を得意としている顕微鏡である。
- *4 GPU (Graphics Processing Unit) : 一般のパソコンなどに使われている汎用性は高いが計算速度が遅い (並列計算が不得意) Central Processing Unit (CPU) に対し、並列計算が得意で、計算速度が速く画像解析に向いている半導体チップを Graphics Processing Unit (GPU) と呼ぶ。高い並列演算性能を活用して、3D グラフィックス以外の計算処理も可能であり、クラスタ化させることによって、スーパーコンピュータに勝るとも劣らない性能を持たせることが可能である。AI (Artificial Intelligence) や機械学習、ディープラーニング (深層学習) などの大規模な処理を得意としている。
- *5 クラスタ計算機 : 多数のコンピュータを結合し、クラスタ (葡萄の房) のように、ひとまとまりにシステム化した計算機である。1 台のコンピュータでは得られないような強力かつ大規模な計算性能を得ることができる。
- *6 走査透過型電子顕微鏡 (Scanning Transmission Electron Microscope: STEM) : 加速電圧 200~300 kV の電子線を、電子レンズを用いて原子レベル以下にまで細く絞り (電子線プローブ)、試料面上を 2 次元スキャンする。試料を透過した電子線をドーナツ型の検出器を用いて検出することで、画像を得る顕微鏡である。現在、空間分解能は 0.08 nm 以下にまで達しており、周期律表にあるすべての元素を、原子分解能で捉えられる顕微鏡である。