第68回応用物理学会春季学術講演会 講演予稿集 (2021 オンライン開催)

TEM 像のパーシステントホモロジーによるアモルファス状態識別

Identification of amorphous states using persistent homology of TEM images

物材機構　○上杉文彦，石井 真史

NIMS,　◦Fumihiko Uesugi,　Masashi Ishii

E-mail: UESUGI.Fumihiko@nims.go.jp

パーシステントホモロジー（PH）は，空孔等の定量解析にホモロジーの概念を適用する手法である[1]. PH では，空間に散らばる空孔の径を徐々に大きくして行くことで空孔同士が接触して繋がり，一つの環ができた時を発生時刻（birth time），そしてさらに径を大きくしてゆき環が再び大きな空孔になった時を消滅時刻（death time）として記録する．これらを二次元図にしたパーシステントダイアグラム（PD）は空孔の空間分布，形状分布の特徴量となるため，一見区別がつきにくい液体，アモルファス，ガラス状態を定量化できると期待される．PD の原理からすると，これらの状態は三次元空間内の原子分布で解析すべきであるが，我々は実用性を考え，顕微鏡像のように二次元面に写像された像への適用の可能性を検討した．

実験はシミュレーションによって得られた GaN の液体とアモルファス状態の TEM 像を PD 化し，それらに対し機械学習による二値判別を行った．その結果，各 PD のサポートベクトルマシン（SVM）による判別精度は，80%を越えることが分かった．特に TEM 像のコントラストは，サンプルの厚さやフォーカス，収差の影響が大きく Diffractgram 等を使っても定量化は困難であるにも関わらず，本手法はこうした観測条件の違いにも Robust であることが分かった（図参照）．二次元写像に PD が適用できる条件の数学的な検討は必要であるが，実用を重視した適用例をトライアル的な第一報として本講演で報告する．

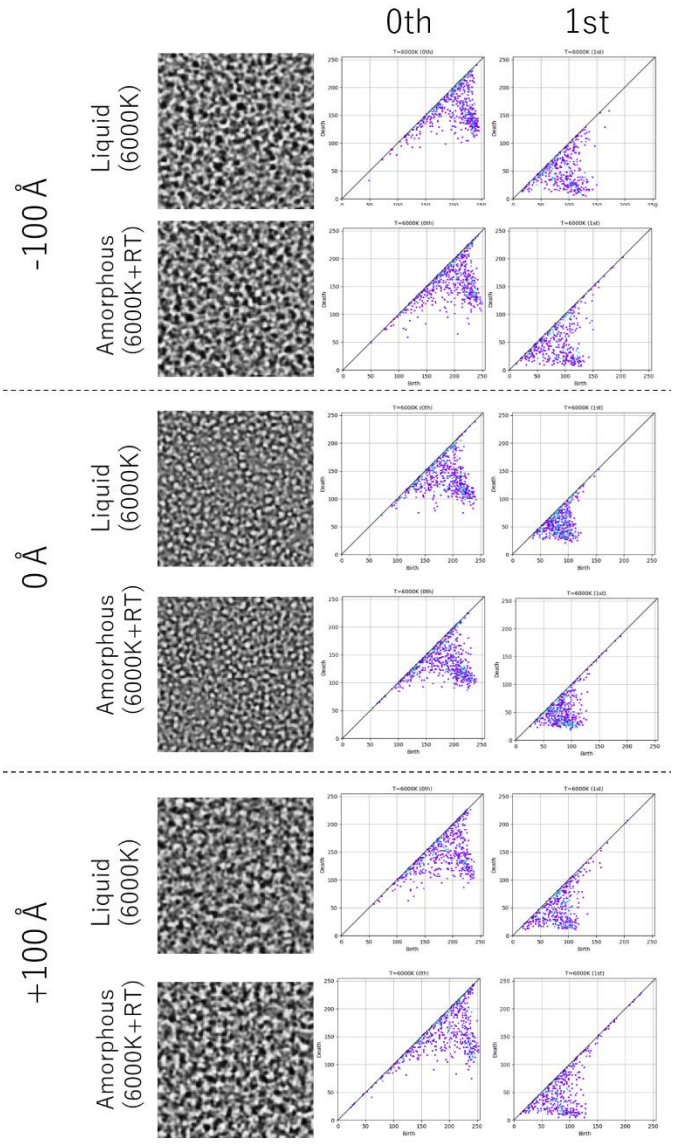

図. 異なったフォーカスによる液体とアモルファス構造の TEM シミュレーション像とそれらの PD.

1.　https://homcloud．dev/index．html

© 2021年 応用物理学会