

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	橋本 綾子
研究機関名	物質・材料研究機構
所属部署名	先端材料解析研究拠点
役職名	主幹研究員
研究課題名	ホモロジー解析による TEM/STEM 画像からの微細構造の定量的深層抽出
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

金属-酸化物複合体 Pt/CeO₂ の合成条件を変えて、様々な微細構造を作製し、ホモロジー解析手法の有効性を系統的に検証した。合成時の酸化条件（温度、混合ガス比）を変えることで、ラメラ構造から粒子状、迷路状の三次元構造までの様々な微細構造を作製することができた。透過型電子顕微鏡（TEM）観察により得られた画像を二値化し、ホモロジー解析を実施した。また、有効性の検証のために、CeO₂ 相の連結性と相関性を持つことが明らかになったイオン伝導性を測定した。さらに、電子線トモグラフィー手法を用いて金属-酸化物複合体の三次元構造も構築した。ラメラ構造の場合、通常の二次元画像を用いたホモロジー解析でもイオン伝導性との相関が得られたが、粒子状、迷路状構造の場合は三次元的に構造が広がっているため、トモグラフィーにより構築した三次元構造をホモロジー解析する必要があることが分かった。

さらに、Betti number だけでなく、Betti curve、Persistence diagram などの各種ホモロジー手法も導入した。Betti number は連結成分数を示すのみであるが、Persistence diagram では、同時に長さ情報も得られる。複合体の走査 TEM（STEM）画像から得られた Persistent diagram を主成分分析し、微細構造の分類を行った。各ホモロジー解析結果と特性評価結果とを比較することで、各解析手法の特長や有効性、適応範囲を検討した。本金属-酸化物複合体 Pt/CeO₂ のような単純な二相の系では、Betti number がイオン伝導に対する第一指標となることが分かった。しかしながら、さらなる構造情報を得るには、Betti curve や Persistent diagram が有効であることが分かった。