

2023 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	国立研究開発法人 物質・材料研究機構
所属部署名	マテリアル基盤研究センター
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	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

### 研究成果の概要

昨年度に引き続き、金属-酸化物複合体 Pt/CeO<sub>2</sub> の合成条件（温度、混合ガス比）を変えて、様々な微細構造を系統的に作製し、ホモロジー解析手法の有効性を検証した。また、本複合体の構造形成を理解するために、数理シミュレーションによる構造生成も行った。その場透過型電子顕微鏡（TEM）観察の結果と比較することにより、主に前駆体の Pt<sub>5</sub>Ce 合金の構成原子の原子拡散率の比によって微細構造が決定されることが示された。

今までに、本複合体の走査型 TEM（STEM）像を二値化し、Betti number を求めて、CeO<sub>2</sub> 相の連結成分数がイオン伝導性に対する第一指標となることを明らかにしてきた。今年度は、他のホモロジー手法としてパーシステントホモロジーを使って、より多くの幾何学的な構造情報を抽出することを行った。まずはパーシステントホモロジーのフィルトレーション過程を理解することで、パーシステント図から 5 つの特徴量を見出した。さらに、ランダムフォレストを活用することで、それらの中から分類に大きく寄与する 2 つの重要な記述子を決定した。それらは構造パターンの乱れと構造の大きさを表す指標と捉えることができ、解釈可能な記述子である。この 2 つの記述子を用いることで、縞状からラメラ構造までの Pt/CeO<sub>2</sub> 複合体の微細構造を分類することに成功した。これらの結果は、主成分分析や階層的クラスタリングによる分類結果とも一致したが、本研究の解釈可能な記述子を使った分類は分類結果も解釈がしやすく、定量的に微細構造を評価することができる。また、定量的な評価結果はイオン伝導性との相関も見られた。