



2026年3月12日

報道関係者各位

慶應義塾大学
株式会社アヤボ

AI×電子顕微鏡による原子数識別技術を確立 —触媒・材料開発の自動化に向けた基盤技術を実証—

慶應義塾大学理工学部化学科の中嶋敦教授と株式会社アヤボらの研究グループは、収差補正走査透過型電子顕微鏡 (STEM) ^{※1)} の画像から、白金ナノクラスター (Pt_n) ^{※2)} の構成原子数を高精度に分類する深層学習技術を開発しました。

近年、生成 AI の社会実装により AI (人工知能) が注目を集めている中、日本の産業競争力を支える「材料・製造分野」においても、AI を活用した研究開発の高度化・自動化 (研究 DX) が重要課題となっています。特に触媒材料は、脱炭素社会の実現に向けて燃料電池・水電解・化学プロセスなど幅広い領域で不可欠であり、性能向上と希少資源の利用効率化が強く求められています。

本研究は、電子顕微鏡による原子スケール観察と AI 解析を融合することで、材料開発のボトルネックとなっていた「原子数の迅速かつ客観的な識別」を可能にしました。これは、次世代のデータ駆動型材料設計 (Materials Informatics) の発展に貢献する基盤技術になることが期待されます。

本研究成果は、STEM 観察画像を教師データとして深層学習により白金ナノクラスターの構成原子数を分類する技術の開発として、2026年2月27日 (英国時間) に Springer Nature が発行する国際学術誌「npj Computational Materials」にオンライン掲載されました。

なお、本研究で用いた教師データは、STEM 観察により白金ナノクラスターの粒径と構成原子数の関係を明らかにした先行研究に基づくものであり、この研究成果は 2025年9月15日 (英国時間) に Elsevier が発行する国際学術誌「Ultramicroscopy」にオンライン掲載されています。

注) 学術誌名: npj Computational Materials

論文タイトル: “Interpretable Deep Learning for Atomicity Classification of Platinum Nanoclusters in STEM Images”

著者: Keizo Tsukamoto¹, Naoyuki Hirata¹, Masahide Tona¹, and Atsushi Nakajima²

¹株式会社アヤボ、²慶應義塾大学理工学部

<https://doi.org/10.1038/s41524-026-02014-z>

学術誌名: Ultramicroscopy

論文タイトル: “Evaluating Atomic Counts in Metal Nanoclusters via Scanning Transmission Electron Microscopy”

著者: Keizo Tsukamoto¹, Naoyuki Hirata¹, Masahide Tona¹, Yoshihiro Nemoto², and Atsushi Nakajima³

¹株式会社アヤボ、²物質・材料研究機構、³慶應義塾大学理工学部

<https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2025.114242>

1. 本研究のポイント

- ・原子数を厳密制御した白金ナノクラスターによる、高信頼 STEM 教師データ基盤を構築。
- ・粒径分布が重なる条件下でも、原子数を高精度に識別可能な AI 分類法を実証。
- ・解釈可能深層学習を活用し、自律型 STEM 計測へ展開可能な基盤技術を提示。

2. 研究背景

金属ナノクラスターは、サイズがサブナノメートル領域に達すると、バルク材料とは異なる特異な電子状態や結合特性を示し、触媒活性や光学特性が劇的に変化します。特に白金クラスターにおいては、構成原子数が 1 個変わるだけで反応性が変化し得ることが知られており、触媒設計において「原子数 (atomicity)」は極めて重要な設計指標となります。

一方で、実際の電子顕微鏡画像から原子数を推定することは容易ではありません。ナノクラスターの投影像は、撮像条件や基板の影響、コントラストの変動、ノイズなどにより複雑に変化します。そのため、粒径分布が重なる領域では、従来の粒径推定に基づく分類は限界を迎えていました。材料開発の現場では、こうした画像解析を複雑化させる要因が、ナノ触媒設計をデータ駆動で加速する上で大きな障壁となっています。この課題を解決するため、本研究で提案するアプローチの全体像と将来的展開を図 1 に示します。

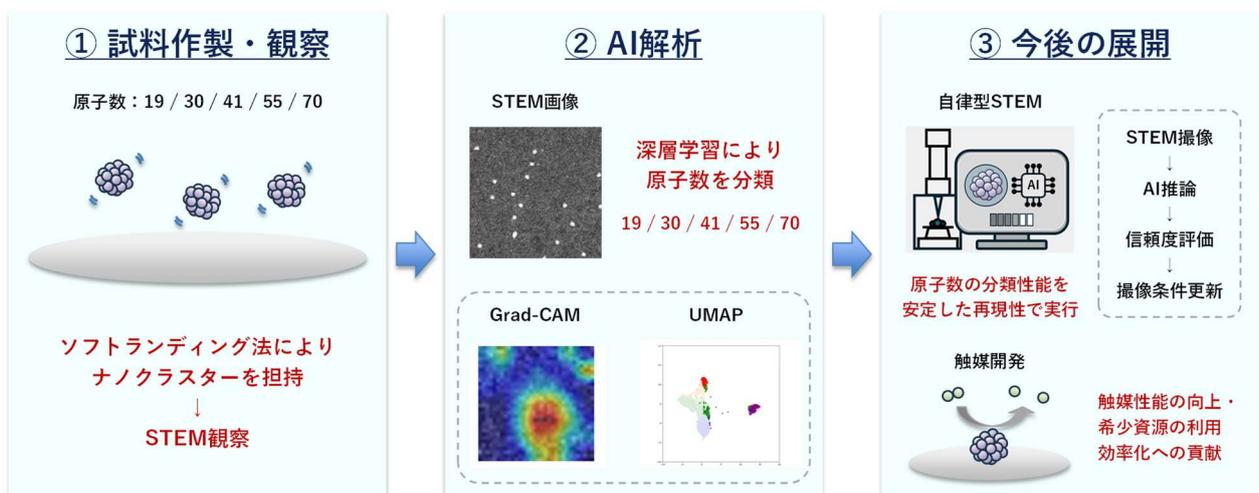


図 1. 本研究の概念図。サイズ選別された白金ナノクラスターのソフトランディング法による試料作製から AI 解析、自律型 STEM・触媒開発への展開までの流れを示しています。

3. 研究内容・成果

◆原子数保証 STEM データセットの構築

本研究では、原子数が厳密に制御された 5 種類の白金ナノクラスター (Pt_{19} 、 Pt_{30} 、 Pt_{41} 、 Pt_{55} 、 Pt_{70}) をソフトランディング法^{※3)}を用いて TEM グリッド上へ担持し、高分解能 STEM 画像を取得しました。

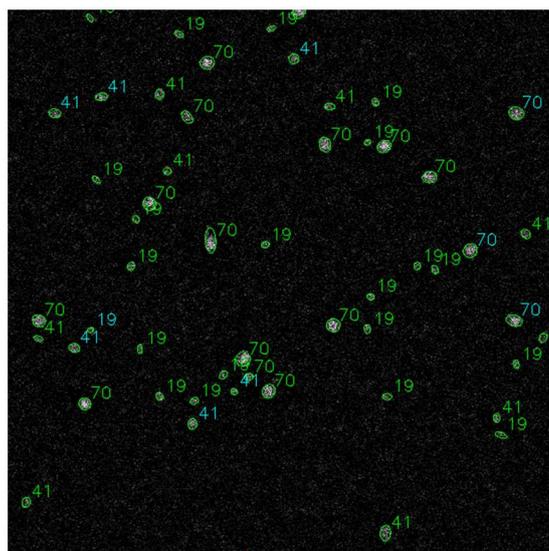
これにより、従来は構築が困難であった「原子数が保証された教師データセット」を整備し、画像

データの深層学習^{※4)}による原子数分類を定量的に検証できる実験基盤を確立しました。これはナノ物質科学において、原子スケールでの AI 解析を支える信頼性の高い基礎データとなります。

◆粒径限界を超える原子数高精度分類の実証

開発したモデルは、ResNet^{※5)}を基盤とする CNN^{※6)}であり、単一の STEM 画像から抽出される構造特徴を用いて原子数クラスを分類します。従来の粒径推定に基づく手法では、粒径分布が大きく重なり合う条件下での識別が困難であり、粒径のみを用いた推定では実験的組成比との一致度(決定係数 R^2)^{※7)}の値は 0.46 に留まっていた。対して、本研究の深層学習モデルでは $R^2 = 0.94 \pm 0.03$ を達成しました。これにより、粒径情報だけでは識別が困難な領域においても、構造の特徴を活用した高精度な原子数分類が可能であることを定量的に示しました。さらに、5種類の白金ナノクラスターのうち Pt₁₉、Pt₄₁、Pt₇₀を順次蒸着した試料の解析においても、図2に示すように 19・41・70 量体が明瞭に分類されました。

順次蒸着した試料: Pt₁₉ / Pt₄₁ / Pt₇₀



従来法 (粒径のみ)

$$R^2 = 0.46$$

本研究 (AI解析)

$$R^2 = 0.94 \pm 0.03$$

図2. 順次蒸着した試料の STEM 像における原子数分類結果。AI 解析により、19・41・70 量体が高精度に分類されています。

◆解釈可能 AI による実体 AI 基盤の確立

本研究では、UMAP^{※8)}による特徴空間の可視化および Grad-CAM^{※9)}による注目領域の可視化を行い、深層学習における AI の判断根拠を解析しました。これにより、ブラックボックス化しがちな AI モデルを解釈可能な枠組みとして整理しました。

さらに、撮像条件の変化(背景、S/N、コントラスト統計の変化)に起因するドメインシフト^{※10)}の

影響を、Leave-One-Image-Out (LOIO) 評価^{※11)}を通じて定量化しました。その上で、高信頼な擬似ラベルを用いた軽量なファインチューニング^{※12)}を行うことで分類性能の回復が可能であることを実証しました。これらの成果は、電子顕微鏡という物理的な画像計測装置と AI を統合する「実体 AI (physical AI)」の技術的基盤を提示するものです。

4. 今後の展開

◆自己校正型 STEM 自律実験プラットフォームの構築

今後は、本研究で確立した原子数分類モデルを単なる解析ツールではなく「計測センサー」として位置付け、閉ループ型 STEM 計測への応用を検討します。

具体的には、

STEM 撮像 → AI 推論 → 信頼度評価 → 撮像条件更新

というフィードバックループを構築し、撮像条件に起因するドメインシフトを実験側で補償することで、常に安定した再現性で原子数の分類を実行できる「自己校正型 STEM 自律実験プラットフォーム」の実現を目指します。

◆材料開発 DX および社会的波及効果

本技術は、脱炭素社会を支える触媒材料の設計指針の構築を加速させ、希少金属の利用効率の高度化に貢献します。また、AI を実験装置と統合することで、実験解析の自動化に留まらず、計測・実験プロセスそのものを高度化する研究開発 DX^{※13)}の基盤技術としての展開が期待されます。こうした取り組みは、触媒材料のみならず、合金材料やナノ構造体など幅広い分野への応用が可能です。日本の素材・触媒材料の産業競争力の強化に資するマテリアルズ・インフォマティクス^{※14)}の技術基盤となることが期待されます。

※本成果は、以下の研究プロジェクトの一部として得られました。

- ・日本学術振興会科学研究費補助金 基盤研究 (B)「均一担持された合金ナノクラスター修飾表面の機能物性研究」(研究代表者：中嶋敦、2024年4月～2027年3月、24K01442)
- ・愛知県『知の拠点あいち』重点研究プロジェクト (第4期)
- ・物質・材料研究機構、マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM) (課題番号：24NM0110)

<原論文情報>

学術誌名：npj Computational Materials (Springer Nature)

論文タイトル：“Interpretable Deep Learning for Atomicity Classification of Platinum Nanoclusters in STEM Images”

著者：Keizo Tsukamoto¹, Naoyuki Hirata¹, Masahide Tona¹, and Atsushi Nakajima²

¹株式会社アヤボ、²慶應義塾大学理工学部

<https://doi.org/10.1038/s41524-026-02014-z>

学術誌名：Ultramicroscopy

論文タイトル：“Evaluating Atomic Counts in Metal Nanoclusters via Scanning Transmission Electron Microscopy”

著者：Keizo Tsukamoto¹, Naoyuki Hirata¹, Masahide Tona¹, Yoshihiro Nemoto², and Atsushi

Nakajima³

¹株式会社アヤボ、²物質・材料研究機構、³慶應義塾大学理工学部

<https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2025.114242>

<用語説明>

※1) 収差補正走査透過型電子顕微鏡 (Cs-corrected Scanning Transmission Electron Microscope; STEM)

電子線を試料に走査しながら透過電子を検出する電子顕微鏡。収差補正技術によりレンズの歪みを抑え、原子レベルの分解能で物質の構造を観察できる。

※2) 白金ナノクラスター

白金 (Pt) の金属原子を数個から数百個集合させて形成される超微粒子。表面原子の割合が高く、構成原子数に鋭敏に依存した物性をもつ極めて微小なナノ構造体である。

※3) ソフトランディング法

質量選別したナノクラスターを低エネルギーで基板上に担持する手法。原子数や構造を保ったまま試料表面に固定できる。

※4) 深層学習 (ディープラーニング)

多層構造の人工ニューラルネットワークを用いてデータの特徴を自動抽出する機械学習手法。画像認識などで高い性能を示す。

※5) ResNet

深い層構造を持ちながら学習を安定化させた CNN モデル。残差接続 (スキップ接続) により高精度な画像分類を可能にする。

※6) 畳み込みニューラルネットワーク (CNN)

画像中の局所的な特徴を効率的に抽出する深層学習モデル。画像分類や物体認識に広く用いられている。

※7) 決定係数 (R^2)

予測値と実測値の一致度を示す統計指標。1 に近いほど高い相関を示す。

※8) UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection)

高次元データを低次元空間に可視化する手法。データの類似性や分布のまとまりを視覚的に把握できる。

※9) Grad-CAM (Gradient-weighted Class Activation Mapping)

深層学習モデルが画像のどの領域に着目して判断したかを可視化する手法。AI の判断根拠を解析するために用いられる。

※10) ドメインシフト

学習に用いた画像データと異なる撮像条件や統計特性をもつ画像を入力した際に、AI モデルの性能が低下する現象。

※11) Leave-One-Image-Out (LOIO) 評価

画像データを使ったモデルの性能を検証するための交差検証する手法の一種で、画像枚数が限られている際の解析や、画像間のばらつきを厳密に評価する場合に用いられる。

※12) ファインチューニング

既存の学習済みモデルを、少量の新規データで再学習させ、新しい撮像条件に対する分類精度を向上させる手法。

※13) 研究開発 DX

研究開発活動そのものをデジタル技術によって変革し、研究の質・速度・再現性・価値創出を飛

躍的に高める取り組みを指す。

※14) マテリアルズ・インフォマティクス (Materials Informatics)

実験データや計算データを蓄積・解析し、データ科学やAIを活用して材料設計や物性予測を高度化する研究分野。従来の経験や試行錯誤に依存した材料開発を、データ駆動型へと転換することを目的とする。

※ご取材の際には、事前に下記までご一報くださいますようお願い申し上げます。

※本リリースは文部科学記者会、科学記者会、各社科学部等に送信させていただいております。

・研究内容についてのお問い合わせ先

慶應義塾大学 理工学部 化学科 教授 中嶋 敦 (なかじま あつし)

TEL : 045-566-1712 FAX : 045-566-1697 (化学科共通) E-mail : nakajima@chem.keio.ac.jp

株式会社アヤボ 代表取締役社長 塚本 恵三 (つかもと けいぞう)

TEL : 0566-71-1060 FAX : 0566-71-1062 E-mail : keizo@ayabo.com

・本リリースの配信元

慶應義塾広報室

TEL : 03-5427-1541 FAX : 03-5441-7640

E-mail : m-pr@adst.keio.ac.jp <https://www.keio.ac.jp/>

株式会社アヤボ (平田)

TEL : 0566-71-1060 FAX : 0566-71-1062

Email : naoyuki@ayabo.com <http://www.ayabo.com>
