物質生命理工学科　　物理・化学・生物・数学

物質計測・イメージング研究室

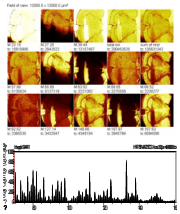
～データから情報を引き出し物理化学現象を明らかにする～

青柳 里果・山岸 崇之

背景

優れた分析技術
先端計測
データ駆動科学

高い研究・技術水準を保つには
- 電気製品、半導体・・・
- 自動車・・・
- 食品、日用品、化粧品・・・
- 医薬品・・・
- 基礎材料：鉄、金属、無機材料、有機材料、高分子・・・



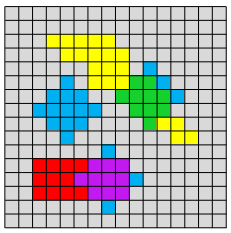
新規材料開発
デバイス評価
医薬品開発
診断技術

計測とデータ解析

測定結果は出てくるが・・・

どの分子がどこにどのくらいの量あるのか？
分子の配向は？
化学状態（反応、結合）は？
どのような化学現象が生じているのか？

現象の解明
物理・化学・生命科学



他成分系試料の計測データ

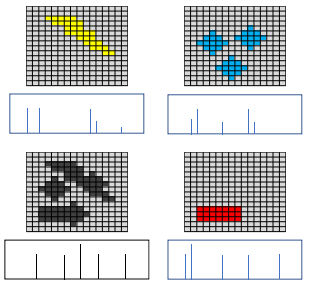
Peak

Pixel/Peak	1.01	...	27.02	...	1000
1					
2					
...					
16384					

Pixel

Input　Output　特徴

データ解析



分子ごとに分布をイメージング

他成分系試料の計測データから純粋成分の化学情報をデータ解析（多変量解析・機械学習・深層学習など）で取り出す。

生物・物理・化学現象解明へ

科学・社会への貢献

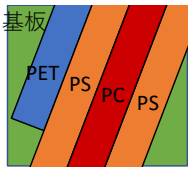
研究室の成果

飛行時間型二次イオン質量分析（TOF-SIMS）：

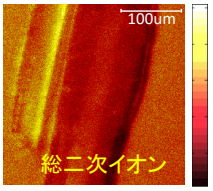
1μm以下の細かさで、分子ごとの分布を明らかにできる分析手法

データが複雑なため解釈が困難な場合がある

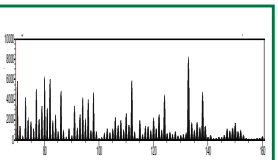
データ解析の応用が有効（多変量解析）



3種類の高分子の4層試料

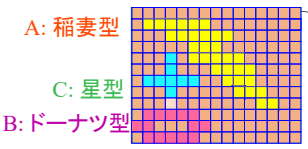


（各分子の分布）



質量スペクトル
（各分子の存在量など）

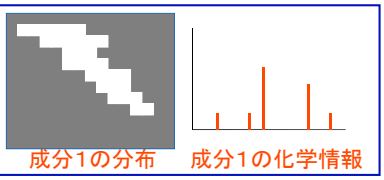
測定データ



一つのピクセルのスペクトル

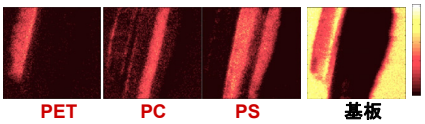
128 x 128 =16,384 個のデータ（非常に多数）

イメージ（分布）とスペクトルデータの多変量解析



データ解析によって未知の成分が明らかになります

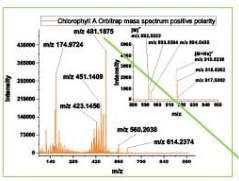
複雑/未知試料
↓
データ解析で検出
↓
イメージ・スペクトルから判断



多変量解析によるデータの分離

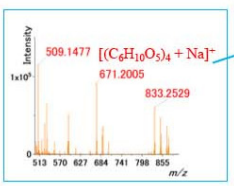
応用例

ごく少量の微小部分分析可能！
未知物質の同定
詳しい化学構造評価
分子イメージング

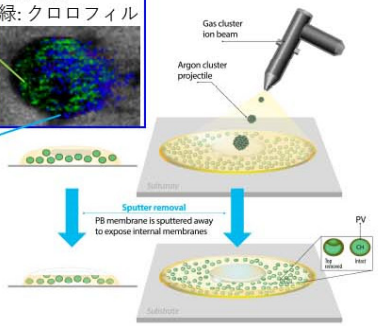


それぞれの物質由来のイオンの分布イメージング

青：PV膜
緑：クロロフィル



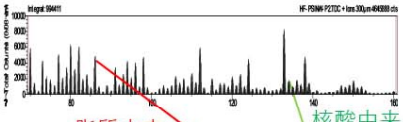
TOF-SIMS



analytical chemistry　Article　pubs.acs.org/ac

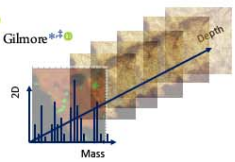
OrbiSIMS Imaging Identifies Molecular Constituents of the Perialgal Vacuole Membrane of *Paramecium bursaria* with Symbiotic *Chlorella variabilis*

Satoka Aoyagi, Yuuki Kodama, Melissa K. Passarelli, Jean-Luc Vorng, Tomoko Kawashima, Keisuke Yoshikiyo, Tatsuyuki Yamamoto, and Ian S. Gilmore

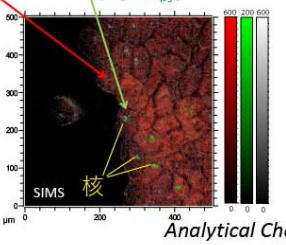


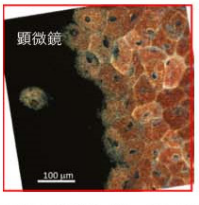
脂質由来イオン像（赤）

核酸由来イオン像



3次元イメージング





スペクトルを読み解き、
- 目的物質の分布イメージを得る！
- 目的の場所の物質を同定する！

Analytical Chemistry 2019, 91, 22, 14545-14551