Combined Filter Function による分子構造像の分解能の向上

(京大化研, Cornell大)

植田 夏, E.J. Kirkland, B.M. Siegel

光源の波長と対物レンズの球面収差係数が既定である電子顕微鏡には, Scherzer の式で記述される固有の分解能の限界があり, 最良の操作条件でもこれを超える事はできない。対物レンズに与えられる defocus 量 Δf に応じて, 結像に寄与する散乱波の位相の乱れ, $\exp(i\chi(u))$ の散乱角依存性, 即ち Transfer function (T.F.) の挙動が微妙に変化する。Scherzer の式は, 可能な限り高角度 α_{max} まで位相がほぼ同位相に保たれる Δf に対応するものである。著者の一人(S)は式: $\Delta f = [(2K - 0.59) C_s \lambda]^2$ の次数 K が, 1, 3, 5... などの値をとるとき, 幅の広いバンドが順次高角度側に現われることを指摘した。これらのバンドは互に相補的に重なり合うので (Fig. 1), α_{max} より高い空間周波領域 α に到る情報を, 否なしに引き出し得る。

一方像面における合成波の振幅を, $1-\phi$ の形で現わすと, $\phi\phi^*$ が 1 に較べて充分小さいと見做し得る場合に限り, 記録された像の強度分布のフーリエ変換が, $\sum F(u) \cdot e^{i\chi}$ の形を保存していることが Hoppe らによって指摘され, 画像処理の基本となっている。よって上記の各 Δf に対応する同一視野の像を, スルーフォーカスによって系列的に記録してフーリエ変換を行ない, 各バンド内に包含される $F(u) \cdot e^{i\chi} (e^{i\chi} \approx 1)$ を, フーリエ空間内に集積し, 逆フーリエ変換を行えば, Scherzer の α_{max} を超えた高分解能の像が再合成される。この場合, $F(u)$ には Friedel の則律が適用可能と見て, 像の合成に実数部のみと利用するのが一般であったが, 結晶中に原子番号が大きく異なる原子が混存すると, 散乱電子の位相を考慮する必要があり, 虚数部をも考慮に容れた Frank 式の処理が必要である。また画像に必然的に含まれる種々のノイズの影響で, T.F. はこれらのバンドにおいても完全には 1 にはならないので, Schiskei によって提案された統計的な取扱いで補正を施さなくてはならない。

以上の方法を京大 500 kV 電子顕微鏡によって撮影された塩化フタロシアニン銅の高分解能分子像に応用し, 重原子のみならず, C や N などによる分子構造の細部を示す像の再合成に成功した。この方法は原則的にはどこまでも高い散乱角領域まで拡張できるが, 現実には T.F. の劣化を評価する Envelope function などの効果を考慮に容れる必要があるのは当然である。

Scattering angle/milliradian
Fig. 1. Band matching of transfer functions for various defocus values. (500kV, $C_s=1.06\text{mm}$)