

論文審査の結果の要旨

論文提出者氏名 杉谷正三

本論文は1編からなり、第1章では序論、第2章では電子顕微鏡における結像の仕組み、第3章では線型逆問題として画像から電子の波動関数を求める問題、第4章ではマルチスライス法により試料から散乱された電子の波動関数を求める方法と画像のS/N比を推定する方法、第5章ではシミュレーション実験により電子顕微鏡法の比較と評価を行なった結果について述べられている。さらに、第6章では測定法の評価に用いられた指標の意味について考察が行われている。

第1章の序論では、本学位論文で行われた研究の背景と目的について述べられている。顕微鏡の第一の目的は目に見えない物を見えるようにすることである。しかし、透過型電子顕微鏡における情報伝達の理論が示すように、測定結果の画像には歪みがあるために目的の試料の構造を再構築することは一般には困難である。歪みの原因はレンズ収差などの技術的問題だけではなく、測定方法そのものにも強く依存している。しかし、測定方法を定量的に比較して評価するための適当な指標が存在していない。通常用いられるS/N比や分解能は、測定方法を評価するには十分であるとはいえない。そこで、論文提出者は測定方法を定量的に評価するための新しい指標を提案することから始め、それらを用いて透過型電子顕微鏡の4つの測定方法、すなわち、明視野像法、位相差像法、デフォーカスシリーズ法、複素観測法を比較して評価することを行なった。

第2章では、本論文の基礎である透過型電子顕微鏡における結像の仕組みとその定式化について述べられている。試料から散乱された電子の波動関数を表すパラメータのベクトルを m 、結像により得られた画像の周波数空間でのデータを表すベクトルを d 、測定方法によって決まる変換行列を G とすると、それらの間には陽的線型関係式 $d=Gm$ が成立する。したがって、結像データから散乱電子の波動関数を求める問題は、線型逆問題として定式化することができる。

第3章では、結像データから散乱電子の波動関数を求める逆問題を解くための方法と測定法の比較を行うための指標について述べられている。試料から散乱された電子の波動関数を表すモデルパラメータの推定値ベクトルである m^{est} は、観測された画像の周波数空間でのデータを表すベクトルを d^{obs} 、一般逆行列を G^{-g} とすると、 $m^{est}=G^{-g}d^{obs}$ で与えられる。ダンピングファクタを先験情報として与えると、逆問題の解の存在と一意性、安定性が保証されるようになり、一般行列 G^{-g} は特異値分解法により求めることができる。論文提出者は、測定方法を定量的に評価するために、この一般逆行列に基づいて情報伝達の信頼性(ITR: Information Transfer Reliability) と情報伝達の総量 Info という2つの指標を提案した。ITRは一般逆行列 G^{-g} と変換行列 G との積であるモデル解像度行列 $R=G^{-g}G$ の対角成分として定義され、真のモデルパラメータが観測された像から推定したモデルパラメータにどれだけ伝達されているかを表している。一方、InfoはシグナルのパワースペクトルをITRの重みを付けて積分した量で、伝達された情報の総量を表している。論文提出者は、透過

型電子顕微鏡の4つの測定方法、すなわち、明視野像法、位相差像法、デフォーカスシリーズ法、複素観測法の比較を行うために、それぞれについて一般逆行列 G^{-1} および ITR の具体的な形を導くことを行なった。先験情報であるダンピングファクタとしては S/N 比の逆数が用いられた。

第4章では、ITR と Info の値を求めるために必要となる S/N 比の推定方法について述べられている。試料から散乱された電子はレンズ系で結像されて試料の像として観測される。その画像に含まれるノイズの主要な原因は入射電子線のショットノイズである。画像に含まれるノイズの S/N 比を推定するためには、透過型電子顕微鏡によって得られる試料の像を計算により求めることが必要である。論文提出者は、散乱された電子線の波動関数をマルチスライス法により計算するプログラムを作成するとともに、変換行列 G を用いて散乱された電子がレンズ系により結像してできる画像を計算するプログラムを作成し、結像した試料の画像に含まれるノイズの S/N 比を空間周波数の関数として求めることを行なった。

第5章では、highpotential iron sulfur protein (HISP) を試料として用いたシミュレーション実験により透過型電子顕微鏡の4つの測定方法の比較を行った結果について述べられている。また、第6章では測定法の比較のための指標として用いられた ITR と Info の意味について考察が行われている。明視野像法、位相差像法、デフォーカスシリーズ法、複素観測法の4つの測定方法について、第3章および第4章で述べられている方法にしたがって試料である HISP の ITR と Info が具体的に計算され、それらの測定方法の比較検討が行われた。その結果、対象とする試料が弱い散乱物体の場合、目的とする分解能が低ければ位相差像の撮影が最も良い結果が得られるという結論に達している。染色などの処理を行っていない生物試料の多くがこの条件に当てはまる。また、位相差像では分解能が不十分である場合には複素観測法とデフォーカスシリーズ法を用いることになるが、従来用いられてきたデフォーカスシリーズ法は新しく登場した複素観測法に比べて得られる情報の定量性に欠けるという点が定量的に示された。さらに、吸収ポテンシャルの効果をモデルパラメータに含めた解析を行う場合には、複素観測法が必須となることも示された。

以上のように、論文提出者は透過型電子顕微鏡の測定方法を定量的に評価するための新しい指標を導出し、それらを用いて実際に測定方法の正確な比較ができること、染色などの処理を行っていない生物試料の画像を透過型電子顕微鏡により高い分解で得るためには複素観測法が最も適していることをはじめて明らかにした。

本論文の研究は、永山国昭氏との共同研究であるが、論文提出者が研究全体を主体的に行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。したがって、博士(学術)の学位を授与できると認める。