

## 電子線トモグラフィー法

## その1：原理

Tomography の語源は、ギリシア語で slice を意味する “tomos” と image を意味する “graph” である。

## Electron Tomography, Its Principles and Elements

金子 賢治<sup>a</sup>, 馬場 則男<sup>b</sup>, 陣内 浩司<sup>c, d</sup>

Kenji Kaneko, Norio Baba and Hiroshi Jinnai

<sup>a</sup>九州大学大学院工学研究院材料工学部門

<sup>b</sup>工学院大学情報学部コンピュータ科学科

<sup>c</sup>京都工芸繊維大学工芸科学研究科生命物質科学域高分子機能工学部門

<sup>d</sup>東北大学原子分子材料学高等研究機構(WPI-AIMR)

**要旨** 近年、電子線トモグラフィ (TEM-CT) 法がナノスケールの空間分解能で内部の複雑な立体的情報を解析する手法として注目を集めています。本稿ではその1：原理と題して TEM-CT 法の原理や歴史的背景、連続傾斜像の撮影と再構築、ラドン変換や再構成法について概説します。

**キーワード**：透過型電子顕微鏡 (TEM)、電子線トモグラフィ、計算機断層撮影法 (CT 法)、FBP 法、SIRT 法

## 1. イントロダクション

生活基盤を支える鉄やアルミニウムといった金属材料や半導体や集積回路といった無機材料、身の回りの生活必需品からハイテク機能・構造材料までをカバーする有機 (高分子) 材料、結晶性材料など、様々な材料なくして我々の生活は成り立ちません。これらの広範な材料のいろいろな特性は、材料内部のナノメートルからサブミクロンスケールの階層的な構造により大きく左右されます。例えば、多くの結晶性金属材料の特性に影響を与える因子として、結晶構造・組成・結合状態・粒子サイズや形態などがあげられます。また、金属材料を有機材料にナノスケールで分散させた“ナノコンポジット”材料は、両成分の良い点を相乗的に反映する先端材料の一つですが、この材料中の金属成分の大きさ・分散状態・配向なども物性に影響する重要な構造因子です。ほとんどの金属材料は多結晶体として多くの結晶粒から構成されているため、結晶粒界、転位、格子欠陥などの内部構造や相変態、粒界すべり、再結晶化などの内部状態の変化が特性に大きく影響を及ぼすこともよく知られています。更には、不純物や添加物、それに伴う析出物の微細構造や形態も金属材料の特性を大きく左右します。これらの因子を一つ一つ丹念に制御することにより、漸く期待される特性を持つ金属材料の創製

や特性を改善することが可能となります。つまり、これらの因子をナノスケールのオーダーで解析することが、新材料の開発や特性の発現メカニズム解明に重要な役割を果たすこととなります。このような重要な因子を解析するために最も有効な手法のひとつは、顕微鏡、特にナノメートルスケールの構造を観察することのできる「透過型電子顕微鏡 (TEM)」を用いた観察法です。

通常、TEM を用いて材料解析を行う場合、2次元透過像や電子線回折パターンを得ることができます。透過像には物質の組織や組成、構造に応じたコントラストが含まれていますし、電子線回折パターンには結晶構造や結晶方位などの情報が含まれていますので、これらの情報を組み合わせることにより、試料内部の様々な情報をサブナノスケールの空間分解能で得ることが可能となります。

しかし、実際のところ、このようにして得られた2次元透過像や2次元投影像、電子線回折パターンから、真の3次元形態を正確に把握することは非常に困難であるうえ、異方性を持つ材料の3次元形態と材料の特性を関連づけることは殆ど不可能です (図1)。また、多くの実用材料は多元素からなる多層膜や多結晶といった複雑な形態や構造を有していますので、ナノスケールの空間分解能で内部の複雑な立体的情報を解析する手法が望まれていました。

トモグラフィ法の歴史は古く、1963年のCormackによるX線トモグラフィ法の理論的考察と数学的解析に関する論文に遡ります<sup>1)</sup>。この理論的考察と数学的解析は、既にRadonによって1917年に提案されていました<sup>2)</sup>。その後、

<sup>a</sup> 〒819-0395 福岡市西区元岡744  
TEL: 092-802-2959  
E-mail: kaneko@zaiko.kyushu-u.ac.jp  
2009年10月9日受付



図1 透過像と投影像, これらの2次元像から左手か右手のどちらの手を撮影したのか判別することは不可能.

この原理に基づいたX線によるトモグラフィ法がイギリスのレコード会社EMIの技師Hounsfieldによって1972年に開発されています<sup>3)</sup>(これらの業績によりCormackとHounsfieldは1979年にノーベル生理学・医学賞を受賞しました). 当初, X線-CT法は体の横断面像のみの撮影に用いられていましたが, 1990年代になるとX線の線源と検出器を対して螺旋状に体の周りに回転させることにより, 3次元情報の取得が可能になり(helical CT), 撮影した領域で任意の断面像を得, 立体画像を構築することが可能となりました<sup>4)</sup>.

TEMとCT法の組み合わせは1966年のDeRosierとKlugによるT4ファージ鞭毛の螺旋構造の発表に端を発しています<sup>5)</sup>. 当時は電子線照射に起因する損傷の低減手法が確立していなかったことや, 画像データを手動で取得していたこと, 画像データ情報がアナログであったこと等, 実験上の手間や装置上の未発達のために非常に困難が伴いました. さらに, 再構築のためのコンピュータ処理速度が遅いことや, 膨大な量のデータを保存するための記憶媒体の欠如等の問題があり, 実用的な手法としてTEM-CT法を行うことはほぼ不可能でした. 20年の時を経て, 1988年に高分子材料の分野でTEM-CT法を使った最初の論文がSpontakにより<sup>6)</sup>, また, 無機・金属材料の分野では2000年にKosterによる最初の論文が発表され<sup>7)</sup>, その後爆発的に論文数が増えてきています. 近年では, 様々な材料の形態や内部構造をサブナノオーダー

の空間分解能で3次元観察をすることが可能となり<sup>8)</sup>, 新しい顕微鏡法の一つとして発展しつつあります.

## 2. TEM-CT法の原理, 連続傾斜像の撮影と再構築<sup>9~12)</sup>

TEM-CT法の原理は基本的に医療分野におけるX線-CT法や磁気共鳴画像法(Magnetic Resonance Imaging: MRI)などによる断層撮影法と同じです. 医療用X線-CT等の場合, X線源とX線検出器が観察対象物体(人間)を中心に同期的に旋回するのに対して, TEM-CT法では電子線に対して試料を傾斜させる手法を用います.

### 2.1 連続傾斜像の撮影とコンピュータによる3次元再構築

TEM-CT法では, 試料を高角度(最大傾斜角度:60°~80°)に傾斜させながら, 連続的にTEM像や走査TEM像(STEM像)を撮影し, 得られた一連の連続傾斜像からその切片の3次元情報を再構築します. 実験の具体的なプロセスは, ①連続傾斜像の撮影(図2a)と②3次元像の再構築に二分されます(図2b). 最近では, ソフトウェアの発達とともに, (S-)TEMによる連続傾斜像の撮影がほぼ自動化されつつあり, 傾斜時の位置ずれや焦点ずれを観察時に補正しながら, 約2時間程度で100枚以上の画像が撮影可能となりつつあります.

### 2.2 Radon変換, 投影像からの再構築<sup>2)</sup>

“Über die Bestimmung von Funktionen durch ihre Integralwerte längs gewisser Mannigfaltigkeiten”

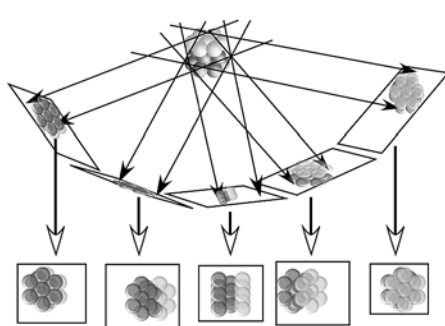
(直訳: “ある多様体に沿った積分値からもとの関数を決定する事に関して”), Radon; 1917<sup>2)</sup>

二次元のRadon変換 $R_L$ を実空間の物体Dを記述する断面像 $f(x,y)$ として定義すると, 任意の投影線Lに沿った信号の積分, すなわち投影は関数 $f(x,y)$ により次のように記述できます.

$$R_L = \int_L f(x,y) ds \quad (1)$$

ここで $ds$ はLの単位長さを意味します. この変換の模式図を図2に示します. Radon変換は各座標の積算となりますので

連続傾斜像の取得



位置合わせ+軸合わせ

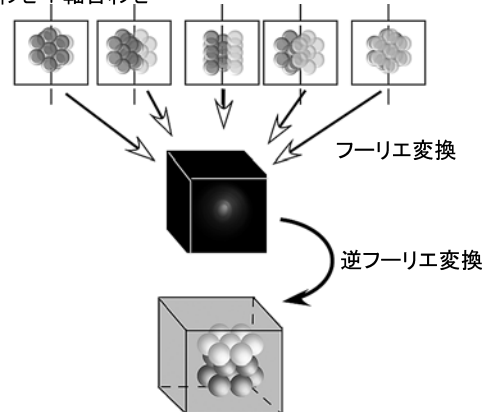


図2 TEM-CT法の概念図. 最初のプロセスである連続傾斜像の取得時に, 視野領域の中心に観察対象像があるとは限らず, これらの画像補整(位置合わせ+軸合わせ)の後, 3次元再構築像が得られる.

で不連続な演算となってしまいますが、幾何学的にはLと平行な方向に観察を行った場合のTEMによる観察とは同一となります。従ってR<sub>f</sub>から元の物体Dの断面像f(x,y)を逆演算することは逆Radon変換に相当し、そのプロセスを逆投影と呼称しています(2.3参照)。現在までに、様々な再構築のアルゴリズムが提案されていますが、基本的にはこの逆変換の考え方が根底にあります。

TEM-CT法では物体Dを回転させて連続傾斜像を撮影しますので、デカルト座標系(x,y)から極座標系(r,φ)に変換すると単純になります。

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \phi = \tan^{-1} \left( \frac{y}{x} \right) \quad (2)$$

図3に示すように極座標系でRadon変換を表記するためには、投影線Lによって定義される投影方向に対する原点への法線(l)の方向と、Lに沿った距離(z)の組み合わせで定義します。角度θは水平方向からLの法線までの角度であり、傾斜角度と同じになります。

ここで、極座標系でのRadon変換を記述すると、

$$R_{f(l,\theta)} = \int_{-\infty}^{\infty} f(r,\theta) dz = \int_{-\infty}^{\infty} f \left( \sqrt{l^2 + z^2}, \theta - \tan^{-1} \left( \frac{z}{l} \right) \right) dz \quad (3)$$

但しl ≠ 0

$$R_{f(0,\theta)} = \int_{-\infty}^{\infty} f \left( z, \theta + \frac{\pi}{2} \right) dz \quad (4)$$

但しl=0

となります。傾斜軸中心から物体D中の点までの距離lと傾斜角度θを用いて投影を記述することが可能となり、物体中の座標、傾斜角度と投影強度というTEM-CT法における実際のデータ取得の状況と対応させることが可能となります。当然ながら、異なる角度θから得られる一連の投影像の枚数の増加に従い情報密度は増加しますので、十分な枚数の投影像を撮影する事により、逆Radon変換を行うことで物体の再構築像を得ることが可能になります。実際の連続傾斜像撮影時の2次元投影像の(l,θ)の関係は不連続ですので、厳密的な意味では再構築像は不完全になります。

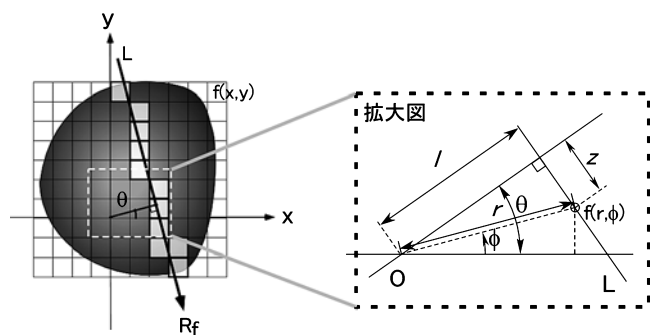


図3 極座標系による物体の座標表記

### 2.3 再構成法：“再構成した断面像”を重ねることにより3次元像を“再構築”できます

連続傾斜像から断面像を再構築するにあたって、「実際に得られた3次元物体の2次元投影像」と「再構築した3次元物体の2次元断面像」が等しくなるように補正する必要があります。両者の一致を実現するために、現在までに様々な解析的および代数的再構成法が試みられてきていますが、その中でも代表的な解析的手法として、逆投影法(BP: Back Projection)法やフィルター付き逆投影法(FBP: Filtered Back Projection)法が、また、代数的手法として、代数的画像再構成法(ART: Algebraic Reconstruction Technique)法や代数的反復法(SIRT: Simultaneous Iterative Reconstruction Technique)法を挙げることができます。解析的手法は投影像を重ね合わせる単純な手法であるのに対して、代数的手法では再構成においてある評価関数を設け、その評価関数の値が最小(または最大)になるように、再構成画像の修正を繰り返し行っていく手法です。このため、代数的手法は解析的手法に比べて再構成に時間を要するのが一般的です。

#### 2.3.1 解析的手法

BP法とは様々な傾斜角度で撮影した投影像を元の物体に、逆(Back)に投影(Projection)する方法であり、投影像の単純な重ね合わせになりますので、一般に、図4に示すように物体の低周波成分が強くなり像がぼやけてしまいます。

BP法を用いた場合、フーリエ空間での情報密度は図5のように低周波成分が高周波成分に比べ強調されてしまいます。これに対し、FBP法では、様々な角度からの各投影データに対し、低周波成分を抑えるようなフィルタリング処理を施し、それぞれの投影方向にデータを戻してフーリエ空間での情報密度を均一にする方法を用います。

BP法やFBP法は単純に投影像を重ね合わせ、対象物体を再構築する手法ですので、投影データを1回用いるだけで画像の再構築が可能となり、短時間で再構築像を得ることができます。反面、デメリットとして再構築像の像質は撮影した投影像の枚数や元々の投影像のSN比に大きく依存することが挙げられます。

図6に示すように、強度の異なる2×2のマスを想定した簡単な2次元像を元に、それぞれのマスの画像強度を数値化

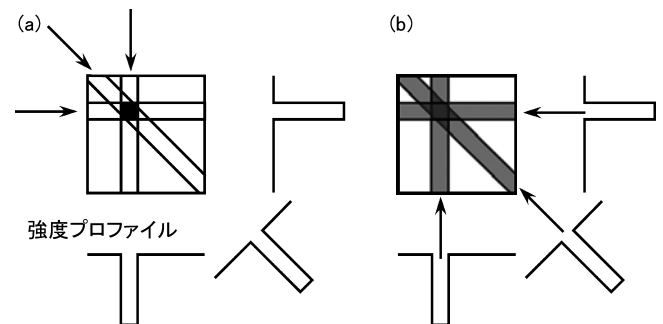


図4 物体の様々な方向からの投影(a)とBP法における逆投影により物体再構成(b)

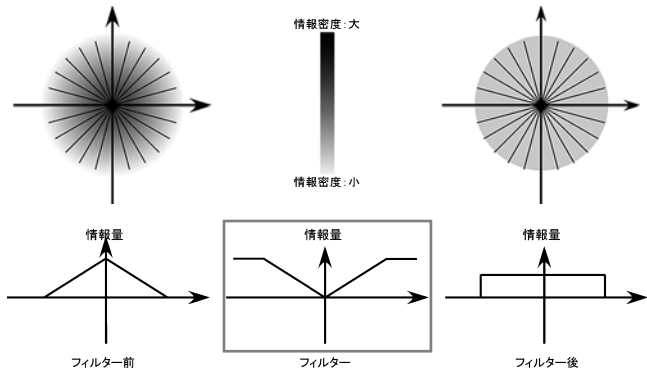


図5 フーリエ空間での情報密度. フィルター前では情報密度が不均一のため低周波情報が強調されぼやけた像となるが、低周波を優先的に減らすフィルターをかけることにより、情報密度が均一となり適切な像が得られる。

(それぞれのピクセルにおける強度を 1, 2, 3, 4) し, 説明します。

プロセス①: 強度の異なる  $2 \times 2$  のマスの強度を数値化する。

プロセス②: 様々な角度から投影し, 得られた投影像のピクセル強度を数値化する。

プロセス③: 右方向からの強度を積算する。

プロセス④: 右斜め方向からの強度を積算する。

プロセス⑤: 下方向からの強度を積算する。

プロセス⑥: 左斜め方向からの強度を積算する。

プロセス⑦: 最後に得られたマスの数値から, あたかも低周波成分を抑えるフィルターとして 10 を減じ, 3 で除算することにより最終解が得られる。

実験的に得られる各投影像には本来の物体の正しい情報を

含むことから, 再構築された物体の情報から再度投影操作を行った像と実験的に得られた投影像を比較しながら, その差異が最小限になるように反復することで再構築像の情報を改善する必要があります。実際の計算においては, 一度の計算で再構築像を完全に補正することはほとんど不可能ですので, 適切な解が得られるまで繰り返し演算を行う代数法が提案されています。

代数法は解析法に比べて再構築像の取得に長時間を要する必要がありますが, データに不完全性があっても BP 法や FPB 法等の手法と比較すると, 再構成した画像においてノイズの影響を受けにくいなどの利点があります。これらの手法の中でも代表的な代数的反復法について紹介します。

### 2.3.2 代数的反復法: SIRT (Simultaneous Iterative Reconstruction Technique)

推定画像の 1 画素を更新する際に, その画素に関するすべての方向の投影データを逐次に参照する方法です。個々の投影角度に対して全ての投影像を同時に実験値と比較し, 再構築情報の収束解を得る反復的な計算を用います。解析的手法と比較すると, データの不完全性があっても致命的なアーティファクトが発生しにくいことや, 一つ一つの投影データに内在するノイズが平均化されるためノイズの影響を受けにくい, などの利点があります。しかし, 反復的な計算を必要とするため, 一枚の画像を再構成するのに要する時間が長い, などの欠点もあります。この方法を簡潔に説明するため, 説明がより簡単な ART (Arithmetic Reconstruction Technique) を用いて具体的な計算例を示します(図7)。なお, SIRT では, 以下の計算プロセス②~④の各画素の更新をその都度行わず, 一旦全ての方向に対する更新数値を列挙し, それらを一

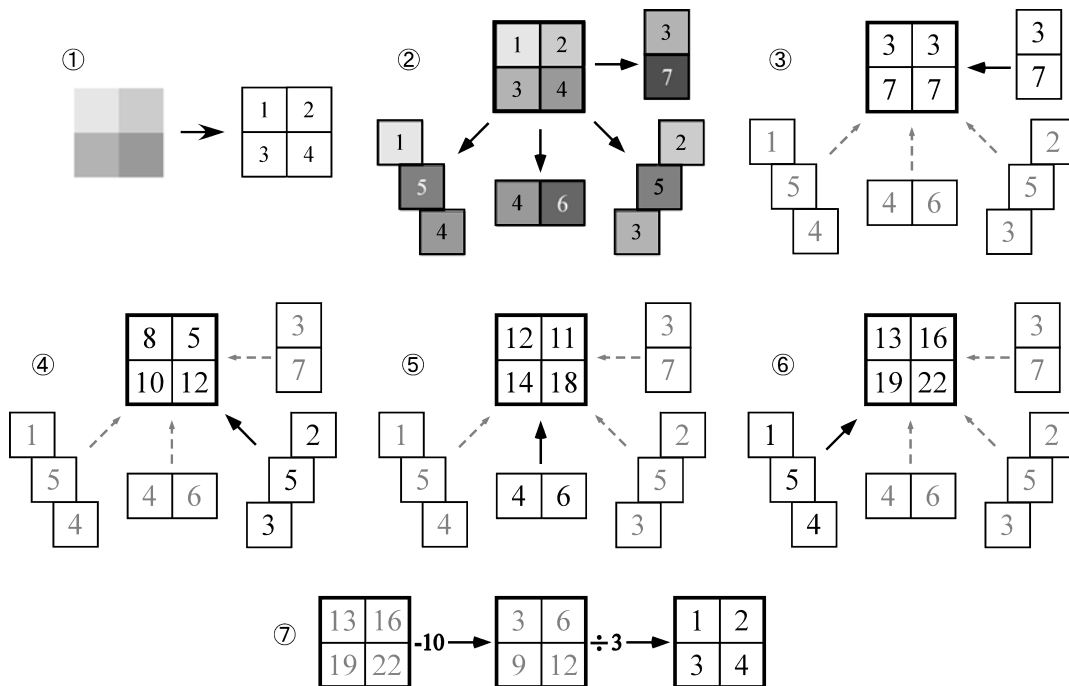


図6 BP 法やFBP 法の概念図

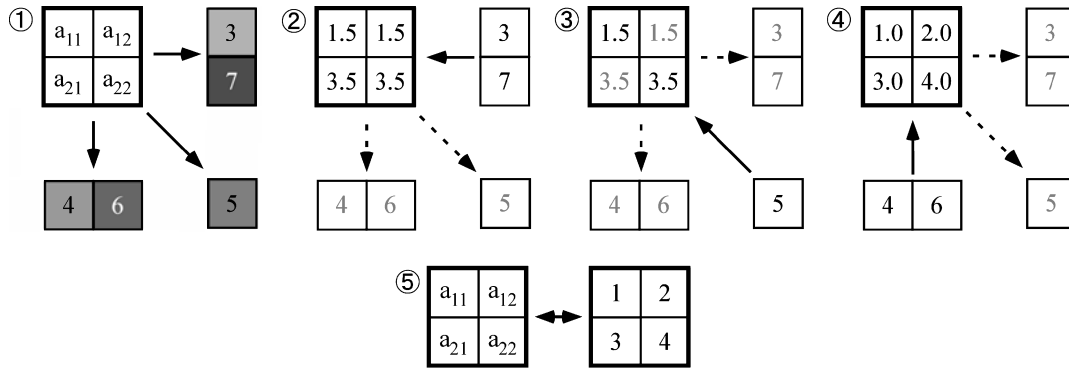


図7 ART法やSIRT法の概念図

括して再度計算し、投影データとの誤差が最小になるように再構成像を更新しています。

プロセス①: それぞれの方向に投影した場合の強度を求める。

プロセス②: 行を2で割った数を代入してみる。

プロセス③: 斜め方向の和を確認する。今回はOK。

プロセス④: 列の和は異なるため、その差を2で割った数(-0.5と0.5)を足してみる。

プロセス⑤: 最終的に  $a_{11}$ ,  $a_{12}$ ,  $a_{21}$ ,  $a_{22}$  が求まる。

### 3. 最後に

本稿ではTEM-CT法の歴史的背景も含め、連続傾斜像の撮影と再構築、ラドン変換や再構成法について論じました。次稿ではTEM-CT法の課題について概説し、応用例として、多種多様な材料の中から分散強化合金を例に取り、TEM-CT法の材料科学における有用性を示したいと思います。

### 文 献

- 1) Cormack, M.: *J. Appl. Phys.*, **34**, 2722–2727 (1963)
- 2) Radon, J.K.A.: *Math.-Phys.*, **69**, 262–277 (1917)
- 3) Hounsfield, G.N.: *British J. Radiology*, **46**, 1016–1022 (1972)
- 4) Heiken, J.P., Brink, J.A. and Vannier, M.W.: *Radiology*, **189**, 647–656 (1993)
- 5) Klug, D. and DeRosier, J.: *Nature*, **212**, 29–32 (1966)
- 6) Spontak, R.J., Williams, M.C. and Agard, D.A.: *Polymer*, **29**, 387–395 (1988)
- 7) Koster, A.J., Ziese, U., Verkleij, A.J., Janssen, A.H. and de Jong, K.P.: *J. Phys. Chem. B*, **104**, 9368–9370 (2000)
- 8) Nishioka, H., Niihara, K., Kaneko, T., Yamanaka, J., Inoue, T., Nishi, T. and Jinnai, H.: *Compos. Interfac.*, **13**, 589–603 (2006)
- 9) Baba, N. and Katayama, E.: *Ultramicroscopy*, **108**, 239–255 (2008)
- 10) Yamasaki, J., Tanaka, N., Baba, N., Kakibayashi, H. and Terasaki, O.: *Philosophical Magazine*, **84**, 2819–2828 (2004)
- 11) 馬場則男: 電子線トモグラフィー再構成の原理, 顕微鏡, **39**, 4–10 (2004)
- 12) 馬場則男: 電子線トモグラフィー, 蛋白質・核酸・酵素 (共立出版), **49**, 1601–1606 (2004)