

透過電子顕微鏡像と分子構造をつなぐ原子番号相関分子模型の提案

(東大院理) ○原野 幸治・Junfei Xing・竹内 啓志・亀井 恒・中室 貴幸・中村 栄一
Atomic-Number-Correlated Molecular Model for Deciphering Transmission Electron Microscopic Images (*Department of Chemistry, The University of Tokyo*) ○Koji Harano, Junfei Xing, Keishi Takeuchi, Ko Kamei, Takayuki Nakamuro, Eiichi Nakamura

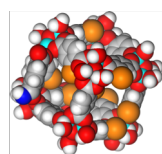
We propose a new molecular model that correctly reflects the characteristics of molecular images taken with an atomic-resolution transmission electron microscope. The "atomic-number-correlated molecular model" (ZC model), which uses the atomic number-dependent image radius determined by electron microscope image simulation as the display radius, enables us to reproduce electron microscopic images of various materials, from individual organic molecules to inorganic solids such as zeolite and sodium chloride.

Keywords : *Single Molecule Imaging; Transmission Electron Microscopy; Molecular Model; Structural Analysis; Atomic Radius*

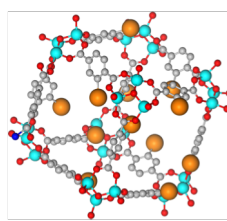
近年の電子顕微鏡（電顕）技術の発展により，原子や分子，さらにはその集合体の動きや反応をあたかも分子模型をみるがごとくに観察することが可能となった．しかし，実際に実験で得られた電顕像を模型で描き出そうとすると，化学者が慣れ親しんだ球棒あるいは空間充填模型から予想されるものとは大きく異なる．これは，空間充填模型は原子の電子雲の広がりを反映した模型であるのに対し，電子顕微鏡像にあらわれる原子像の濃さはその原子の原子番号(Z)に依存したものになるからである．この不一致が分子科学における原子分解能電顕の普及を妨げていた．本研究では我々は，電顕像シミュレーションを用いた検討により、電子線量に応じた画像ノイズを考慮すると，電顕像において視認される原子サイズが原子番号に強い相関を示すことを発見した．これに基づき，原子分解能透過電子顕微鏡で撮影した分子像の特徴を正しく反映する新しい分子模型として，電顕像シミュレーションを用いて決定した原子番号に依存した原子像半径を表示半径に用いた「原子番号相関模型(ZC model)」を新たに提唱した.¹⁾この模型を用いる事で，ひとつひとつの有機分子像から，ゼオライトや塩化ナトリウムのような無機物の固体まで，様々な物質の電顕像を模型で再現することが可能となった．

Z-correlated atomic radii

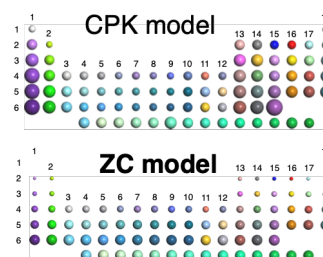
New molecular model
reflecting nuclear charge



CPK model



ZC model



1) J. Xing, K. Takeuchi, K. Kamei, T. Nakamuro, K. Harano, E. Nakamura, Atomic-Number (Z)-Correlated Atomic Sizes for Deciphering Electron Microscopic Molecular Images, *arXiv*, 2107.01490.