

東京大学大学院工学系研究科 総合研究機構

第8回「次世代電子顕微鏡法」講演会

2022年4月14日 13:00 - 15:00 オンライン開催



収束電子回折法による局所結晶構造・ 静電ポテンシャル分布解析の開発と応用

津田健治

東北大学 学際科学フロンティア研究所

収束電子回折(Convergent-beam electron diffraction: CBED)を用いた局所結晶構造・静電ポテンシャル分布解析法の現状と今後の展望について議論したい。

CBED 法では、ナノ電子プローブを用いて試料の厚さ一定でほぼ完全結晶とみなせる領域を選択し、エネルギーフィルターを用いて非弾性バックグラウンドを除去することで、得られた CBED 図形の回折強度分布を動力学回折強度計算と定量比較することが可能となる。これにより、原子位置、原子変位パラメーター(ADPs)等の結晶構造パラメーターを決定することができる [1-3]。さらに、低次反射の結晶構造因子を独立なパラメーターとして扱うことで、価電子情報を含む静電ポテンシャルおよび電子密度分布が得られる [4-7]。従来の X 線・中性子回折による結晶構造解析では、動力学回折効果に起因する消衰効果が低次反射で無視できない場合があり、低次反射の解析精度低下の原因となっていた。これに対して CBED 法では動力学回折強度計算と直接比較するため、消衰効果の補正の問題なしに低次反射の結晶構造因子をより高い精度で決定できる利点がある。動力学回折理論による強度計算は大きな計算量を必要とするが、計算機の高速度化、並列計算、DFT 計算の援用などにより解析可能な範囲が拡大している [3,5,7]。

加えて、CBED 法では、試料のナノ領域の局所構造情報が直接得られる点が大きな特徴である。走査透過電子顕微鏡(STEM)法と CBED 法を組み合わせることで、不規則性を有する試料において、局所構造の変化とその分布をナノスケールで調べることが可能となる [8,9]。酸化物強誘電体にこの方法を適用し、X 線・中性子回折で報告された平均構造の他に、局所構造のゆらぎ・分極ナノドメインが存在することを直接可視化することに初めて成功し、巨視的物性への影響を指摘した [8-11]。また、プローブサイズに依存して異なる対称性が現れる階層的構造の存在を示した [10,11]。さらに、双晶界面でのみ現れる強誘電相の構造解析 [12]や、電場下での分極ナノドメインの応答その場観察 [13]など、適用を広げている。このような不規則性を有する構造の解析では、決定すべき構造パラメーターの数が格段に多くなるため、機械学習など情報科学の応用が今後大きく期待される。

- [1] K. Tsuda and M. Tanaka, *Acta Crystallogr. A* **51**, 7 (1995).
- [2] K. Tsuda and M. Tanaka, *Acta Crystallogr. A* **55**, 939 (1999).
- [3] Y. Ogata *et al.*, *Acta Crystallogr. A* **60**, 525 (2004).
- [4] K. Tsuda *et al.*, *Acta Crystallogr. A* **58**, 514 (2002).
- [5] Y. Ogata, K. Tsuda, and M. Tanaka, *Acta Crystallogr. A* **64**, 587 (2008).
- [6] K. Tsuda *et al.*, *Phys. Rev. B* **81**, 180102 (2010).
- [7] B. Aryal *et al.*, *Acta Crystallogr. A* **77**, 1 (2021).
- [8] K. Tsuda, A. Yasuhara, and M. Tanaka, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 082908 (2013).
- [9] K. Tsuda and M. Tanaka, *Appl. Phys. Express* **8**, 081501 (2015).
- [10] K. Tsuda and M. Tanaka, *Appl. Phys. Express* **9**, 071501 (2016).
- [11] K. Tsuda and M. Tanaka, *Jpn. J. Appl. Phys.* **56**, 10PB09 (2017).
- [12] D. Morikawa and K. Tsuda, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 092901 (2021).
- [13] D. Morikawa and K. Tsuda, *Appl. Phys. Lett.* **119**, 052904 (2021).



東京大学
次世代電子顕微鏡法
社会連携講座

主催: 「次世代電子顕微鏡法」社会連携講座
e-mail: info@ngem.t.u-tokyo.ac.jp