

2023 年度年次報告書

原子・分子の自在配列と特性・機能

2022 年度採択研究代表者

森川 大輔

東北大学 多元物質科学研究所

助教

二次元配列構造における局所電子密度分布および物性解析手法の開発

研究成果の概要

本研究では、ナノ電子プローブを用いた2次元配列物質の局所領域の結晶構造および電子密度分布解析の実現と、第一原理計算との協奏による物性解析手法の開発を進めている。本年度の成果は以下の通りである。

界面や境界を含む超構造における収束電子回折図形： これまでに、超構造において各プローブ位置での収束電子回折図形のシミュレーションを実現していたが、実験データ解析のためには従来の構造最適化ルーチンを入れ替え可能となるよう改良する必要があった。そこで種々のpythonパッケージが利用可能となるよう改良し、特に局所解から抜け出すためのルーチンを導入した。また、90度分極方向が回転している分極ドメイン壁における収束電子回折図形取得に成功し、シミュレーションによって分極回転を定性的に示すことに成功した。収束電子回折図形の対称性を定量的に評価することで、分極回転の幅や、その外側に数 nm ずつ存在する、バルク構造から乱れている領域を実験的に初めて明らかにした。

第一原理計算による電子密度分布を用いた収束電子回折図形のシミュレーション： 電子密度分布からX線の結晶構造因子を求め、それを電子線の結晶構造因子へ変換する。そして求めた結晶構造因子を用いて収束電子回折図形をシミュレートする手順を確立した。ここで、計算に求められる電子密度分布のピクセル数や、不足時の補間方法を検討し、テスト物質における収束電子回折図形の再現に成功した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Daisuke Morikawa, Yuji Noguchi, and Kenji Tsuda, “Direct observation of rotation of polarization at 90-degree domain walls in BaTiO₃”, *Japanese Journal of Applied Physics*, 62, SM1003 (2023).
- 2) Md Shafiqul Islam, Daisuke Morikawa, Shigeki Yamada, Bikas Aryal, Kenji Tsuda, and Masami Terauchi, “Determination of the crystal structures of NdBaMn₂O₆: Coexisting polar and nonpolar phases”, *Physical Review B*, 108, L060104 (2023).
- 3) Hiroshi Nakajima, Kento Uchihashi, Hirofumi Tsukasaki, Daisuke Morikawa, Hiroyuki Tanaka, Tomohiro Furukawa, Kosuke Kurushima, Jun Yamasaki, Hiroki Ishibashi, Yoshiki Kubota, Atsushi Sakuda, Akitoshi Hayashi, and Shigeo Mori, “Aligned polar boundaries and oxygen storage in ferroelectric Ho(Mn, Ti)O_{3+δ}”, *Physical Review Research*, 5, 023203 (2023).