

計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の
開発と応用

2018 年度採択研究者

| |
|------------------|
| 2020 年度 年次報告書 |
|------------------|

石川 亮

東京大学 大学院工学系研究科

特任准教授

オンライン自動収差補正による3次元電子顕微鏡法の開発

§ 1. 研究成果の概要

収差補正レンズの開発とコンピュータによる制御による高度化により、原子レベルでの局所構造解析は比較的容易になった。しかし、得られる構造情報は観察方向に沿って2次元に投影された結晶構造であり、3次元の原子位置情報の取得は困難な状況になる。本研究では、大収束角を用いることで深さ分解能を大幅に向上し、原子レベルでの3次元情報を取得することを目的とする。これに伴い、低次幾何収差の最適化を行う。

本年度は、低次の幾何収差が原子像に与える影響を統計的観点から評価した結果、画像の分散値(σ)を平均値で規格化した統計量の極大値において鮮明な原子像が取得できることが明らかとなった。低次収差から逐次補正を行うことで、大収束角での原子分解能観察が比較的容易になりつつある。これらのプロセスは極大値の検出を行うことにより自動化が可能であり、本年度は自動収差補正に向けたプログラムを更新した。また、本手法は、最も一般的な環状暗視野法のみではなく、微分位相コントラスト法などの明視野領域においても活用できる。特に、明視野領域では、残留収差に極めて敏感であり、原子電場や電荷密度分布の取得が大収束角では困難である。しかし、本手法を応用することにより、高精度での実験が可能になりつつある。

【代表的な原著論文情報】

- 1) R. Ishikawa, R. Tanaka, S. Morishita, Y. Kohno, H. Sawada, T. Sasaki, M. Ichikawa, M. Hasegawa, N. Shibata, Y. Ikuhara, “Automated geometric aberration correction for large-angle illumination STEM”, **Ultramicroscopy** 222 113215 (2021).
- 2) J. Wei, B. Feng, R. Ishikawa, T. Yokoi, K. Matsunaga, N. Shibata, Y. Ikuhara, “Direct imaging of atomistic grain boundary migration”, **Nature Materials** on-line (2021).
- 3) K. Nakayama, R. Ishikawa, S. Kobayashi, N. Shibata, Y. Ikuhara, “Dislocation and oxygen-release driven delithiation in Li_2MnO_3 ”, **Nature Communications**, 11 4452 (2020).
- 4) G. Schusteritsch, R. Ishikawa, A.R. Elmaslmane, K. Inoue, K.P. McKenna, Y. Ikuhara, C.J. Pickard, “Anatase-like Grain Boundary Structure in Rutile Titanium Dioxide”, **Nano Letters**, 21 2745 (2021).
- 6) J. Zhu, R. Osuga, R. Ishikawa, N. Shibata, Y. Ikuhara, J.N. Kondo, M. Ogura, J. Yu, T. Wakihara, Z. Liu, T. Okubo, “Ultrafast Encapsulation of Metal Nanoclusters into MFI Zeolite in the Course of Its Crystallization: Catalytic Application for Propane Dehydrogenation”, **Angewandte Chemie International Edition** 59 19669 (2020).
- 7) A. Ishizuka, K. Ishizuka, R. Ishikawa, N. Shibata, Y. Ikuhara, H. Hashiguchi, R. Sagawa, “Improving the depth resolution of STEM-ADF sectioning by 3D deconvolution”, **Microscopy** (Oxford, England), 70 241 (2021).
- 8) R. Ishikawa, Y. Jimbo, M. Terao, M. Nishikawa, Y. Ueno, S. Morishita, M. Mukai, N. Shibata, Y. Ikuhara, “High spatiotemporal-resolution imaging in the scanning transmission electron microscope”, **Microscopy** (Oxford, England), 69 240 (2020).