

原子・分子の自在配列と特性・機能
2022 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

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。2022 年度後期に開始した本研究では、以下の研究成果を得た。

1. 界面を含む超構造に対する収束電子回折図形シミュレーションの実現

ナノ電子プローブを用いた収束電子回折図形の強度分布は、サブ pm の原子変位や価電子密度分布の変化に敏感であるが、そのシミュレーションには電子線の多重散乱を計算する必要がある。これまでに単位胞を用いたバルク構造の計算は実現していたが、本研究のターゲットである 2 次元配列物質の界面を含む超構造の計算のための改良を行った。例として結晶学的な双晶を含む超構造を用意し、各電子プローブ位置における収束電子回折図形のシミュレーションに成功した。また同様の条件で撮影された実験の強度分布の傾向を再現することに成功した。

2. 超構造解析のための計算条件の確立

多重散乱を考慮した計算の強度分布と、エネルギーフィルターによって非弾性散乱の寄与を除いた実験の強度分布を定量的に比較し、原子位置や温度因子、低次の結晶構造因子を精密化することで、局所領域の構造解析を実現させる。これまでにパラメータ数の少ないバルク構造に対しては解析が実現しているが、本研究における超構造ではパラメータ数が膨大となる他、計算コストも急激に増大する。そこで実験を再現するに足る計算条件を探索し、超構造解析のための解析条件を確立した。