

金 [110] 傾角粒界原子配列の解析 (II)

—電顕格子像のシミュレーションと画像処理—

Analysis of Atomic Configuration at the [110] Tilt Boundaries of Gold (II)

—Computer Simulation and Processing of the Lattice Image—

田中 真一*・市野瀬 英喜*・石田 洋一*

Shin-ichi TANAKA, Hideki ICHINOSE and Yoichi ISHIDA

1. はじめに

速報 (I) で観察された格子像が結晶中を通過した電子波のどのような干渉であり、電磁レンズの収差がどう影響しているかということに関しては、幸い位相物体近似による計算¹⁾²⁾ が有効なので、種々の結像条件で計算し格子像と比較することによって、原子配列の解析ができる。前報³⁾ では色収差が大きくないと考え { 333 } まで含めた像計算をしていたが、正しくないことがわかったので、計算も速報 (I) と同様に { 200 } まで含めて行い、格子像位置との一致関係を再検討した。また実際の格子像写真を画像処理し、規則粒界における格子点位置関係を測定した。

2. 格子像の計算

格子像の計算には一般に位相格子の重ね合せ近似 (m-

ulti-slice) か波動力学近似 (wave dynamical formulation) が用いられる。前報で示したように両者はよく一致するので本報では全て比較的計算の容易な波動力学の近似で計算した。

一般に加速された電子波が内部ポテンシャル $V_0(r)$ なる結晶に入ると、回折により次のようなブロッホ波の一次結合で表現される波となる。

$$\varphi(r) = \sum A_j \sum C_g^{(j)}(\mathbf{K}^{(j)}) \exp\{2\pi i(\mathbf{K}^{(j)} + g) \cdot r\}$$

ここで A_j は結合定数、 $C_g^{(j)}(\mathbf{K}^{(j)})$ は振幅、 j は回折波の数、 g は回折ベクトル。これがシュレディンガー方程式を満足するとして適当な境界条件のもとで解くと、試料下面の波動関数が求まる。 $V_0(r)$ の場所によるちがいが波数ベクトル $\mathbf{K}^{(j)}$ のちがいとなってあらわれ格子像の原因となる。

この波が球面収差 C_s なる対物レンズを通りぬけるとときには $r(\theta_g)$ なる位相のズレを生じる⁴⁾。

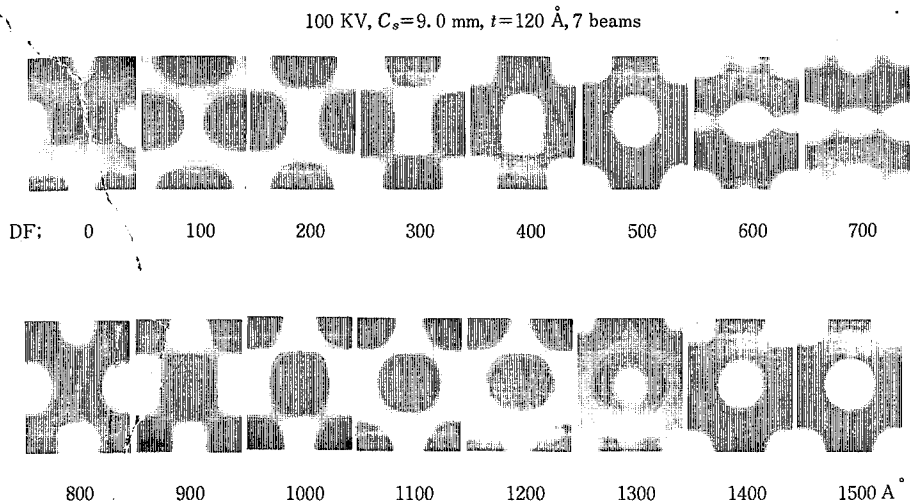


Fig. 1 正焦点からのずれによる像の変化

*東京大学生産技術研究所 第4部

$$r(\theta_g) = \pi / 2\lambda \{ C_s \theta_g^4 - 2\Delta f \cdot \theta_g^2 \}$$

ここで Δf は正焦点からのずれ、 θ_g は回折角度である。多波格子像はこのように位相の異なる回折波、透過波の相互干渉による干渉縞である。

本計算では電子波として透過波のほかに回折波 {111} と {200} まで含めて計算した。{220} 以上の回折波は加速電圧の 10^{-6} 程度のゆれや電磁レンズ電流の変動により、像が大幅に変わり平均されるので、けっきょく結像に寄与しないからである。

3. 計算結果

Fig. 1 は上記の方法で正焦点より弱い側へレンズ強度をかえて像の変化を調べたものである。中央と四隅に {110} 原子鎖の位置がある。速報 (I) の装置条件では Δf が 40 ~ 60 nm, 140 ~ 150 nm で原子鎖位置が明るく、90 ~ 120 nm 付近で暗く見える。この結果は Fig. 2 (a), (b) のようにレンズの伝達関数を書いてみると判りやすい。加速電圧 1 MV の場合、試料厚さ 10 nm 程度までは厚さによりコントラストは変わらない (Fig. 3 (a))。加速電圧 200 kV ではこうはゆかない、Fig. 3 (b) に示されるように厚さにより反転している。K^(j) の差による原子鎖付近での位相の遅れがあまりに大きくなって、像の白黒を反転させてしまうことがわかる。Fig. 4 (a), (b) はこのようなちがいを示したものである。入射電子線の方向が {110} 原子鎖の方向といく分ちがっているとき像の位置はどう変化するかを示したのが Fig. 5 である。{111} Bragg 回折は X 方向に 0.087° 、Y 方向に 0.061° 傾いた角度であるが、格子像の対称性はこの角度ですでにくずれている。したがって、一般に良好な格子像に解析を限定する限り、格子像位置と

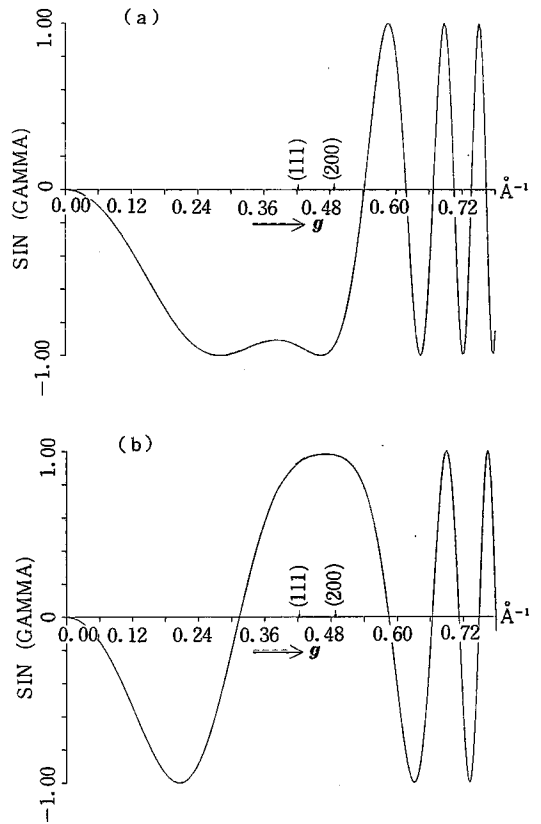


Fig. 2 原子位置が白丸、黒丸になるときのレンズの伝達関数。(a) $\Delta f = 100$ nm, (b) $\Delta f = 150$ nm, $\sin \gamma = 1, -1$ のときコントラスト最大になる。上の条件では、{111} {200} とともにこの条件を満たしている。加速電圧 1 MV, $C_s = 9.0$ nm として計算。

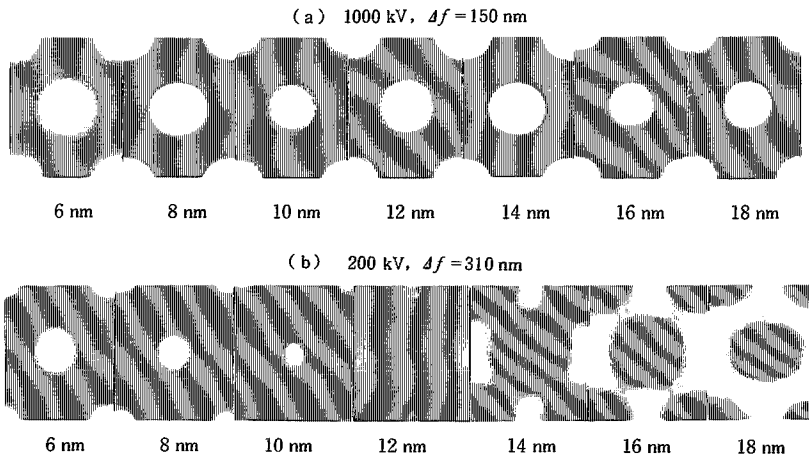
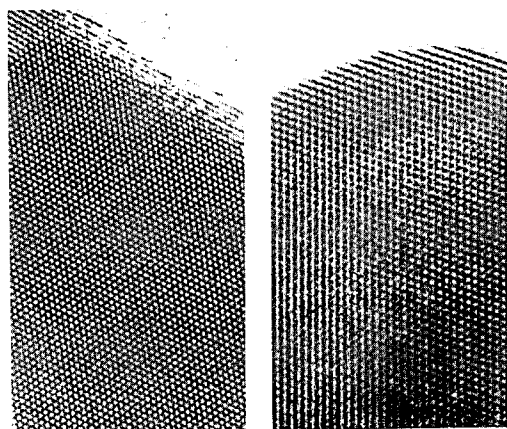


Fig. 3 試料厚みの変化による像の変化、加速電圧は (a) 1000 kV, (b) 200 kV Δf をそれぞれ 150 nm, 310 nm として計算

研 究 速 報

〔110〕原子鎖の位置とは比較的によく一致するとみられる。

4. 画像処理による格子点位置の決定



1000 KV (a) 200 KV (b)

Fig. 4 加速電圧による電顕像の違い

実験的に格子点位置と原子鎖位置との一致を確かめてみたのが Fig. 6 の整合双晶境界における解析である。本所多次元画像処理センターのデジタルテレビジョンに格子像写真を入力し、ミニコンのディスクに記憶して原子列位置を1個ずつ平均化により決定した。次に個々の{111}原子面につき短冊状の領域で原子面に垂直な方向に足し合わせて明るさのピーク位置を求め、これを格子点の位置とした。解析は2例について行ったが、整合双晶境界に平行な{111}原子面の間隔は最大で16%異なっていた。また左右両粒について、上下への相対的

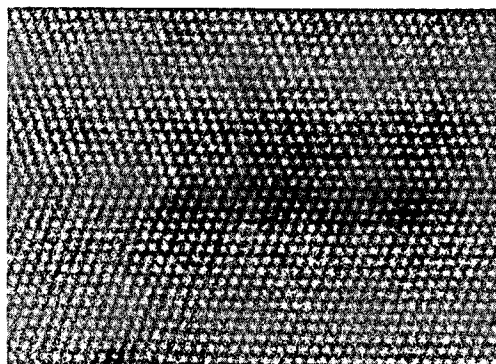


Fig. 6 $\Sigma 3$ 整合双晶境界の格子像

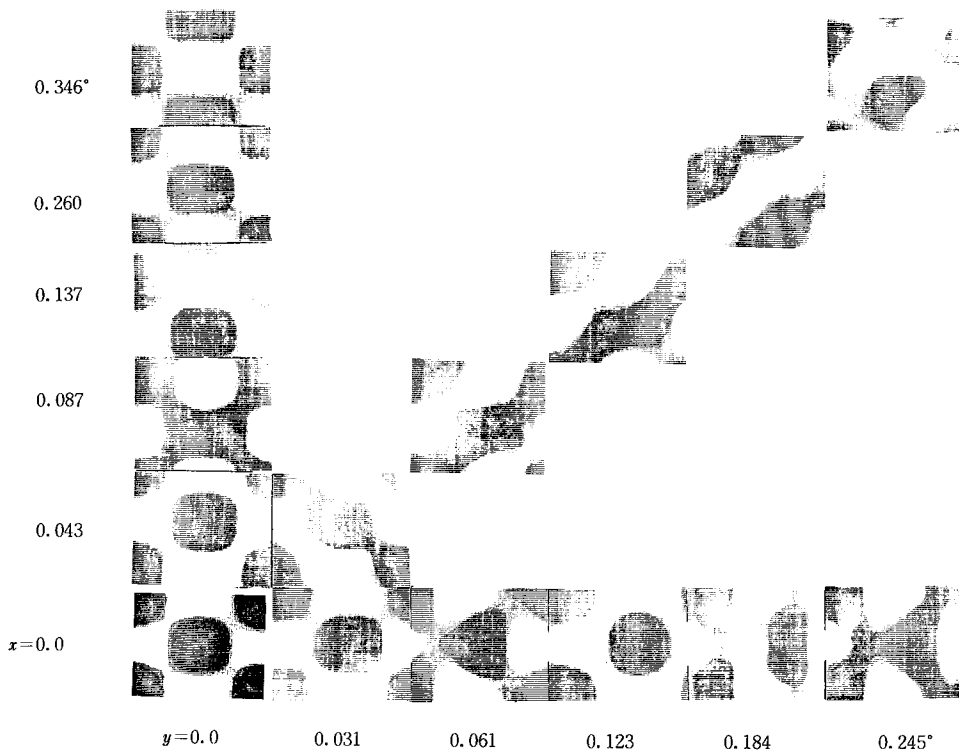


Fig. 5 入射ビームが傾きを持ったときの像の変化

シフトは、ともに2%以内であり、粒子荒れの著しい高倍率引伸ばし写真の銀粒子位置のパラッキとはほぼ同程度であった。

面間隔についての同様な解析を配列のわかっていないΣ11粒界で行ったのがFig.7である。この粒界は{111}面にして2面の周期構造をしているから、後続の速報(Ⅲ)に示されるように、構造によっては{113}面間隔が1つおきに大きくなったり小さくなったりする。このような変化はΣ11粒界の〔110〕回転軸を入射電子像の方向とが完全一致していない写真からでも検出可能であると考えられ、都合が良い。実際 Fig.8 に示されるように{113}面間隔は変化しているものもある。良質の写真がないので今は結論はさしひかえる。

画像処理に協力していただいた本所、多次元画像処理センターの富田氏に感謝する。(1980年4月17日受理)

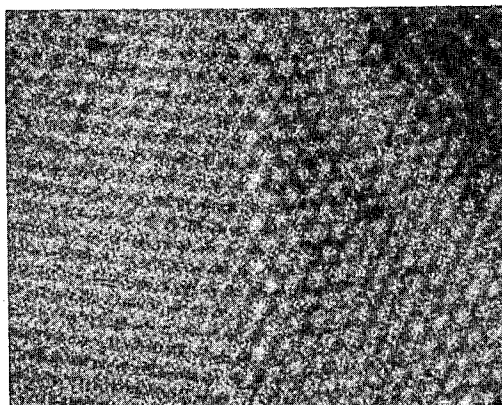


Fig. 7 Σ11 対応傾角粒界

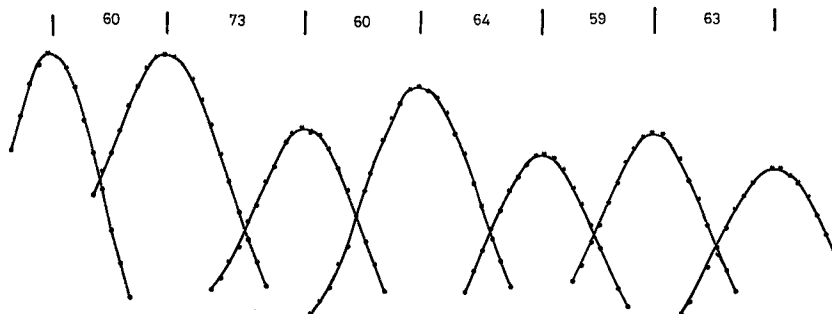


Fig. 8 画像処理によるΣ11対応傾角粒界の{113}面間隔の解析結果

参考文献

| | |
|--|---|
| 1) D. Goodman and A. F. Moodie: Acta Cryst. A 30 (1974) 280 | A 267 (1962) 206 |
| 2) H. Howie and M. J. Whelan: Proc. Roy. Soc. | 3) 市野頼英喜, 石田洋一, 森 実: 生産研究 30 (12) (1978) 456 |
| | 4) O. Scherzer: J. Appl. Phys. 20 20 (1949) |

