

## シミュレーションの基礎 Fundamentals of Simulation

今野 豊彦

Toyohiko Konno

東北大学金属材料研究所

キーワード：透過電子顕微鏡，シミュレーション，結晶学，位相コントラスト，多変量解析

電子顕微鏡による結像や分光は電子線と物質との相互作用とそれを検出する機器側における光学系を含んだ様々な形態の処理の産物であり、得られた一次データから必要な情報を抽出するためには、引き起こされる個別の現象を正しく把握しておかねばならない。一方、コンピュータの進展は物理的視点にたったモデル化により、結果を予測あるいはシミュレートすることを可能としている。電子顕微鏡による解析とは逆問題を解くことに似ており、この意味でシミュレーションは現代の研究者にとって便利なツールであるが、一方でコンピュータやアルゴリズムはブラックボックスであってはならない。

取差補正技術の進歩により1オングストローム以下の分解能でイメージを取り入れることが可能となってきた。しかしそれは結晶を特定の晶帯軸から観察する場合に限られる。またこれまで公表されているデータの大半は立方晶系もしくは六方晶系という対称性の比較的高い物質群に対してとられたものである。一方、我々が現実遭遇する物質は、工業的に平衡状態から意図的にずらして作られたもの、鉱物や酸化物のように対称性が低く、また同素変態などで異なった結晶系に属する状態が混在する場合などが多い。これらは基本的なことではあるものの、現実には立方晶系から逸脱した途端に、長年、電子顕微鏡を用いて構造解析に携わってきた者さえも簡単には対処できないことが数多く発生する。そのような場合、エバルドの作図という基本に立脚したソフトウェアが必須であり、実際にはさらに励起誤差などの実験的な情報が加わることで現実の使用に耐えうる道具となる。

一方、いわゆる高分解能観察における結像過程をシミュレーションするためには物質中における散乱およびレンズ系による結像という二つの計算を行わなくてはならない。前者は電子の固有状態という大局的な観点もしくは薄いスライス状に投影されたポテンシャル間の散乱波の伝搬という観点からなされ、後者はコントラスト伝達関数というフィルターのかかったフーリエ変換によって達成される。この状況は1970年代と変わっていないが、一方でこの間に大きく進展したのが走査型透過電子顕微鏡(STEM)によるコントラストである。STEMがもたらす情報は検出器の配置によって様々な内容を有しており、干渉性の弾性散乱だけではなく非干渉性の熱散漫散乱を含めた正しく評価することによって初

めて、そのコントラストに正しい解釈を下すことができる。

試料を構成する元素の電子状態に関しても電子顕微鏡は有用な情報を与えてくれる。すなわち入射電子線は薄片試料中で基底状態に存在する電子を励起状態に推移させることが可能で、その際の電子線のエネルギー損失を分光することにより(Electron Energy Loss Spectroscopy)、もともとの基底状態が化学的にどのような固有状態であったかを知ることができるのである。しかしこのためには多電子系のシュレディンガー方程式を解くことが必須である。昨今、よく耳にする第一原理計算とは基底の選び方の自由度から始まり、非常に多くの近似のもとでなされる計算であり、実験的に得られたEELSスペクトルの正しい解釈にはその論拠となる計算がどのような仮定のうで成されたかを理解しておく必要がある。

さらに組成分析という観点からすると、電子顕微鏡における解析手段として最も普及している技術が特性X線エネルギー分光法(EDS)である。ハード的には過去のシンチレータタイプから最新の半導体検出器に変遷を遂げているもののエネルギー分光であることに起因する分解能には大きな変化はない。しかしコンピュータの処理能力の発展はかつては考えられなかった膨大な量のデータを統計学的に処理することを可能にしている。この結果、個々のスペクトルにあるピークは検出限界ギリギリであっても、その元素の存在の有無をより客観的に主張できることが可能となった。現代の研究者にとっては統計学的処理法を正しく身につけることが一つの「たしなみ」となってきたのである。

以上の観点から本特集ではそれぞれの分野の第一線で活躍されておられる研究者の方々に、現代の電子顕微鏡を扱うには欠くことの出来ないいくつかのシミュレーション法や統計的手法を解説していただいた。コンピュータの中でなされる様々な「現象」は本質的に厳密・緻密であり、丸め誤差等を除いて曖昧さは極めて少ない。このようなことがらを限られた紙面の中でまとめるのは至難の業であるにも関わらず、個々の記事は大局観を失わずかつ重要なポイントを網羅した内容ばかりである。コンピュータを用いた補助的解析が日常的に成されている現在、我々研究者にはソフトウェアをブラックボックスとしてではなく、主体的に使いこなすだけの技量が求められている。今回の特集が電子顕微鏡を用いた研究者の自己研鑽の一助となれば幸いである。