

Bloch 波法による STEM 像シミュレーションの積層試料への応用

長崎大学大学院生産科学研究科 森村 隆夫

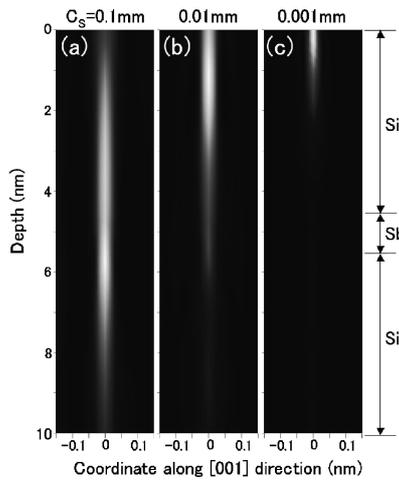


Fig. 1 様々な球面収差係数 C_s に対する、積層試料内の電子強度の計算結果。縦軸は[110]に沿った試料深さ、横軸 x は[001]方向の座標を示す。原子コラム位置は $x=0$, -0.136 nm となる。 $x=0$ へのプローブ照射を仮定した。各層の位置を像の右側に示す。

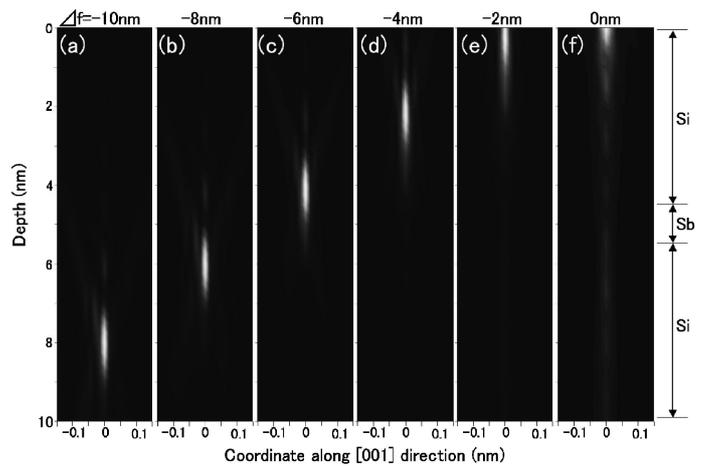


Fig. 2 様々なデフォーカス Δf に対する、積層試料内の電子強度の計算結果。アンダーフォーカスを負と定義し、 $C_s=0.001$ mm を仮定した。

近年、Bloch 波法による STEM 像のシミュレーション法が Allen 等によって進展した⁽¹⁾⁽²⁾。彼らは、電子線非弾性散乱過程の散乱断面積を第一原理的に計算し、結晶内に分布するチャンネル電子強度との積により HAADF, EDX, EELS, BSE に対する STEM 像の計算を定式化した。さらに、励起振幅の算出や Bethe 行列のブロック対角化等を工夫し、計算時間を著しく短縮させた。本研究では、Allen 等の手法を発展させ、試料の厚さ方向に異なった相が積層する試料に対し STEM 像のシミュレーションを行った。この手法の開発により、析出物、格子欠陥、原子変位を有する不均質な試料への応用が可能となる。

Si(厚さ 4.5 nm), Sb(1 nm), Si(4.5 nm) の 3 層のダイヤモンド型結晶が積層する試料を仮定し、[110]から電子線プローブを照射した時の電子強度の計算結果を Fig. 1 に示す⁽³⁾。各層間の波動関数を境界条件で結び、各層におけるブロック対角化散乱行列の積で波動関数を求めることができた。図は、プローブが原子コラム位置に集中し、球面収差係数 C_s の減少とともに深さ方向の分解能が向上することを示している。

Fig. 2 には、 $C_s=0.001$ mm における、電子強度のデフォーカス Δf 依存性を計算した⁽³⁾。約 1 nm の深さ方向の幅をもち、 $|\Delta f|$ の深さ付近に電子線が集中することを示している。Fig. 3 には、[110]からのプローブ照射に対する、EDX-STEM 像の Δf 依存性を計

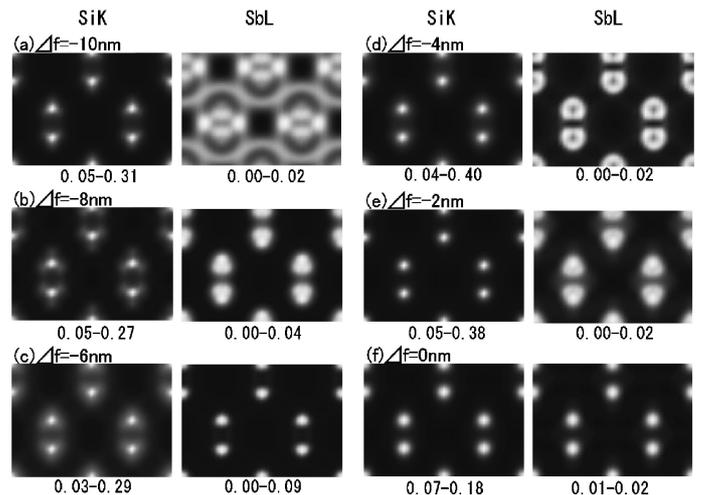


Fig. 3 [110]からのプローブ照射に対する、積層試料の EDX-STEM シミュレーション像。 $C_s=0.001$ mm を仮定した。各像の上にデフォーカス量を、下に強度の最小値と最大値を示している。

算した⁽³⁾。Sb-L 線による STEM 像は $\Delta f=-6$ nm 付近で最大強度を示した。STEM 像の Δf 依存性の計算結果と測定結果を比較することにより、3次元の結晶構造解析が可能となることが示唆される。

文 献

- (1) L. J. Allen, S. D. Findlay, M. P. Oxley and C. J. Rossouw: Ultramicroscopy, **96**(2003), 47-63.
- (2) S. D. Findlay, L. J. Allen, M. P. Oxley and C. J. Rossouw: Ultramicroscopy, **96**(2003), 65-81.
- (3) T. Morimura and M. Hasaka: Ultramicroscopy, **109**(2009), 1203-1209.

(2009年7月15日受理)

Bloch-wave-based STEM Simulation in Layer-by-layer Representation; Takao Morimura (Graduate School of Science and Technology, Nagasaki University, Nagasaki)

Keywords: Bloch wave method, inelastic scattering, layer-by-layer

Observation condition: HAADF-STEM, EDS