

$$\begin{aligned}
 &= \int e^{-\pi \sum_i x_i^2 - \pi \sum_i y_i^2} T_r \exp \left\{ -\beta \left[\hat{\mathcal{L}}_B - \mu \hat{V} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + 2i \sqrt{\frac{\pi v}{2\beta}} \sum_i n_i x_i + 2i \sqrt{\frac{\pi J}{\beta}} \sum_i \hat{\xi}_i y_i - \sum_i 2\mu_B \hat{H} \hat{S}_i \right] \right\} dx_i dy_i
 \end{aligned}$$

汎函数積分と static 近似で

$$e^{-\beta F} = \int e^{-\pi \sum_i x_i^2 - \pi \sum_i y_i^2 - \beta f(\beta, \mu, H, x, y)} dy_i$$

$$h_i = \sqrt{\frac{\pi J}{\beta}} y_i - \mu_B H_i$$

$$F = -kT \ln \left(\frac{\beta}{\pi J} \right)$$

(文責 星 淳一)

原子レベルでの電子顕微鏡学

— レンズ結像型電子顕微鏡コントラスト —

講師 大阪大学工学部 橋本 初次郎

最近の高性能の電子顕微鏡はその分解能が著しく向上し、点間隔で 3 \AA 、結晶の格子面間隔に対応する縞で 0.72 \AA の写真が写されるようになっている。しかし、このような電子顕微鏡を用いて結晶や分子内の一つ一つの原子を観察するには様々な困難な問題が存在する。以下、1) 空間に孤立した単原子と、2) 結晶内に配列した原子を可視化する場合の結像の原理についての概要を述べる。

1. 単原子の電子顕微鏡像

電子顕微鏡像の分解能 d は、絞りによる回折収差とレンズの球面収差とを考慮して、optimum なレンズの開き角 $\alpha_{\text{opt}} (= 1.13 (\lambda/C_s)^{\frac{1}{4}})$ に対し

$$d = 0.56 \lambda^{\frac{3}{4}} \cdot C_s^{\frac{1}{4}} \quad (1)$$

と求まり、これは電子線の波長 λ と球面収差係数 C_s とで決まる。単原子像を観察する時重要な問題は分解能よりむしろ像のコントラストである。単原子の場合、原子で吸収される電子はわずかで、像のコントラストは原子を通りぬける時に受ける位相のずれとレンズで結像される時の位相のずれに基づく位相コントラストが大部分である。レンズに対する開き角が α で入射した電子波が、正焦点像より Δf だけずれた像面でもつ位相角のずれは、

$$\gamma = \pi/2 \lambda (C_s \cdot d^4 - 2 \Delta f \cdot \alpha^2) \quad (2)$$

で与えられる。今、静電ポテンシャルが ϕ の物体中を電子が通過し、これをレンズで結像したときの像の強度は、

$$I = 1 - 2 \sigma \phi \cdot \mathcal{F}(\sin \gamma) \quad (3)$$

で与えられる。ただし、 $\sigma = \pi/\lambda E$ で E は加速電圧を表わす。 $\sin \gamma$ が ± 1 の時、最大の位相コントラストが得られる。 $\sin \gamma$ を実際のレンズについて数値的に調べることから、焦点外れ量 Δf の変化により、高いコントラストで写し出される試料の大きさが変化することが理解される。

電子顕微鏡で物体の像を写像する時、レンズの後焦点面には物体を透過した波のフーリエ変換で与えられるフラウンホーファー回折像が生じるが、波の位相は (2) 式で与えられる量だけずれている。後焦点面上にある絞りの効果を入れてこの回折像をフーリエ変換することにより、電子顕微鏡像の理論的強度を計算することができる。原子の像を計算すると、適当な条件の下で、明視野像では像を識別し得る最小限度の5%よりやや高いコントラストが得られ、暗視野像では強度が入射波の1/500位であるが、コントラストは1の像が現われる。従って、もしノイズの十分小さい支持膜を使うなら、原子を観察し得る可能性が生じる。支持膜としては、カーボン膜、アルミナ膜のような非晶質膜を使うほか、グラファイトのような結晶薄膜が用いられる。後者の場合、回折斑点をはずして絞りをおくのであるが、支持膜のノイズを非常に小さくすることができる。

2. 結晶内原子の電子顕微鏡像

結晶の場合、入射電子は結晶内でブラッグ反射をし、このブラッグ反射波がレンズを通りぬけて結像する。結晶内での電子の振舞を記述する理論としては、次のものがこれまでに提案されてきた。

1. 位相格子近似
2. 電子回折運動学的理論による近似
3. Multi-Slice 法による近似
4. Projected Charge Density 法による近似
5. 電子回折動力学理論による近似

これらの近似法を実際に適用する場合には、試料の厚さ、その他の因子を考慮した上で適当なものを選ばねばならない。上のような方法で記述された波が、収差と有限な絞りをもつレンズを通りぬけて像面に現われる。像コントラストを論ずるには、焦点外れ量を含めこれらを考慮しなければならない。アノサイト長石に対する計算例を見ても分かるように、像は試料の厚さ、焦点外れ量に対して大きく変化し、非常に限られた条件下においてのみ実際の原子配列に対応した像コントラストが得られる。

なお、講義では、電子顕微鏡内でタングステン等の酸化物を気相成長させ、直接観察録画した興味深いフィルムの上映も行なわれた。 (文責 山本直紀)

誘電体結晶における逐次相転移

講師 東工大・理 弘 津 俊 輔

ある結晶において、温度の変化に伴い2つ以上の相転移が次々と起こるような場合、その結晶は逐次相転移を起こすという。誘電体分野においては、近年特に、このような“逐次性”を持つ相転移の研究が盛んになって来ている。そこで、 CsPbCl_3 、 CsPbBr_3 などを始め、種々の誘電体結晶における逐次相転移を実験的・理論的に研究して来られた、東工大・理：弘津俊輔氏を講師にお招きして、逐次相転移を取り扱う上で特徴的な概念や手法などについて講義して載いた。以下講義の概要について報告する。(全体講