

ナノ電子プローブによる界面の 電子密度分布解析の実現

Analysis of Interfacial Electron Density Distribution using Nano-Electron Probes

東北大学 森川 大輔



近年の IoT 社会を支える先進的電子デバイスでは、異種材料が接する界面における局所的な電子状態が、デバイス全体の物性を支配している。顕微鏡技術の目覚ましい発展により原子の空間配置は同定可能となったが、理論計算で予測される電子密度分布を実験的に検証する手段はこれまで存在しなかった。したがって、界面物性を決定づける主役である電子密度分布、すなわち電子の空間的な広がりを実験的に可視化することは、物質科学や材料工学における長年の大きな課題であった。そこで本研究では、ナノサイズに収束した電子線を照射する収束電子回折 (CBED) 法を応用し、結晶界面における局所的な電子密度分布を実験的に決定する、全く新しい手法の確立を目指した。

まず、界面のような巨大超構造に対し、照射位置を細かく変化させながら各プローブ位置での CBED 図形を高速シミュレーションする手法を開発した。これにより、双晶界面の特異な分極構造やドメイン壁の解析を実現し、半導体の pn 接合の解析[1]へも応用展開した。しかし、構造の巨大化や複雑化に伴い、解析に必要な計算パラメータが爆発的に増大するという本質的な壁に直面した。広大なパラメータ空間において従来の最適化手法では局所解にトラップされてしまうため、大域最適化の導入などの工夫を進めているが、従来型の構造最適化とは全く異なるアプローチが必要となっている。また、界面以外の重要なターゲットとして、相共存などの複雑かつ不均一な系が挙げられる。その代表例であるリラクサー誘電体では、構造の不均一性自体が優れた材料特性を支配している。これまでにナノドメインの温度変化の可視化には成功[2]したものの、ナノメートルスケールで 3 次元的に解き明かす手法は現状存在しない。解析要素が極めて多い不均一構造の解析においても、同様に革新的なアプローチが必要不可欠であった。

そこで現在、この課題を打破する新たなアプローチとして、深層学習を用いた解析を進めている。プローブ照射領域のわずかな結晶学的変化に対し、CBED 図形の強度は極めて鋭敏に反応する。畳み込みニューラルネットワークなどの画像認識 AI は、この複雑な変化を体系的に捉えるのに適しており、従来とは全く異なる方法論による局所構造解析が実現し得る。すでに分極ナノドメインの積層構造解析において概念実証を達成しており、現在は最大の難関である、実験データとシミュレーションの乖離を埋めるドメイン適応の課題に着手している。本研究で構築する解析プラットフォームは、単なる一顕微鏡技術に留まらない。将来的には、実際に電圧を印加したオペランド状態で電子の動的挙動をリアルタイムに追跡するという、究極の材料開発ツールの実現を目指している。

【キーワード】 結晶界面、収束電子回折、電子密度分布

【参考文献】

[1] D. Morikawa, M. Saito, H. Sasaki, K. Tsuda, *J. Phys. Mater.* **9**, 015006 (2026).

[2] K. Hino, D. Morikawa, D. Fu, M. Itoh and K. Tsuda, *Appl. Phys. Lett.* **128**, 142901 (2026).