



研究室紹介

大阪大学大学院 工学研究科 物質生命工学専攻 計算物理学講座

高井 義 造*

Computational Physics, Department of Material and Life Science,
Graduate School of Engineering, Osaka University

Key Words : 電子顕微鏡, 表面・界面物性, 原子レベルキャラクタリゼーション,
マイクロビームアナリシス, 計算物理学
Electron Microscope, Surface and Interface Physics,
Atomic Level Characterization, Micro-Beam Analysis,
Computational Physics

1. はじめに

物質科学や生命科学の諸現象を理解するためには、原子・分子や電子のレベルで何が起きているかを解明することが極めて重要である。我々の研究室では、観測することが自然現象を理解する出発点であるという立場から、これまでにない新しい顕微鏡や計測技術を開発し、同時に多電子論を取り入れた第一原理計算を行うことで、局所領域の構造や電子状態、ならびにダイナミクスを実験物理と計算物理の両方の観点から解明する研究を行っている。物質科学においては、表面・界面物性の分野を中心に研究を展開しており、また生命科学の分野でも生体分子構造の研究を新たに開始しようとしている。

我々の研究室は発足してようやく1年が経過したところである。現在の構成員は、職員として木村吉秀助教授と永富隆清助手、リサーチアソシエイトならびにポスドクが3名、大学院博士課程の学生が4名、修士課程の学生が9名、それに近々配属される学部学生が若干名である。

2. 研究の概要

我々がこれまでに手掛けてきた代表的な研究をいくつか紹介する。

2-1. 新装置, 新手法の開発: 一超電子顕微鏡の開発一

電子顕微鏡は発明されてすでに半世紀以上が経過し、ミクロの評価技術として物質科学と生命科学の両分野で確固たる位置を占めているのは周知の通りである。しかし発明以来いまだに解決されていない2つの問題がある。1つは電子顕微鏡のレンズには凹レンズがなく、光学顕微鏡のように組み合わせレンズにより球面収差を除去することができないことである。そのため球面収差がもたらす像のボケが現在の電子顕微鏡の分解能を制限している。もう一つは電子波に対する理想的な位相板がないため、光学顕微鏡のように容易に位相差顕微鏡が実現できないことである。我々はこの2つの問題を実時間で解決するために、電子顕微鏡の結像光学系の特性を正確に写し取った変調信号を高電圧加速電源に加える能動型結像変調法を開発し⁽¹⁻²⁾、平成8年度より日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業の援助を受け「次世代超電子顕微鏡(超解像位相差電子顕微鏡)の開発」に取り組んでいる(図1)⁽³⁾。この新しい電子顕微鏡では10マイクロ秒毎に次々に変わっていく加速電圧の下で得られる電子顕微鏡像を差分処理する事で球面収差の影響が補正された位相差像を観察することが可能である。この新しい顕微鏡で観察すると、まるで生き物のように結晶表面を運動する個々の原子を鮮明にとらえることができる。

図2は金(011)結晶を通常の電子顕微鏡と超解像

*Yoshizo TAKAI
1955年9月19日生
1983年大阪大学大学院工学研究科
応用物理学専攻博士課程修了
現在、大阪大学大学院工学研究科
物質・生命工学専攻 計算物理学講
座, 教授, 工学博士, 電子顕微鏡学・
応用物性学・計算物理学
TEL 06-6879-7842
FAX 06-6879-7843
E-Mail takai@ap.eng.osaka-u.
ac.jp



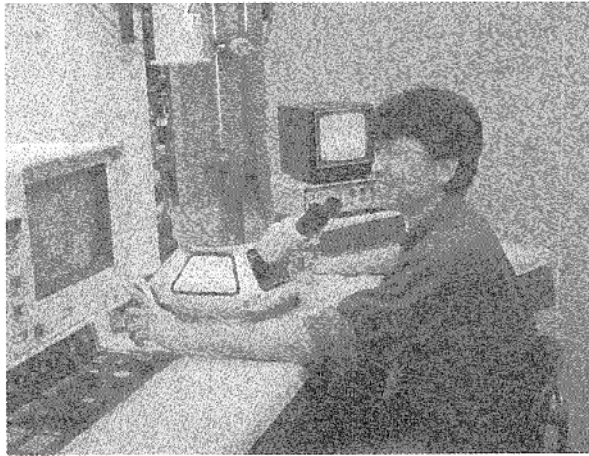


図1 開発中の超電子顕微鏡

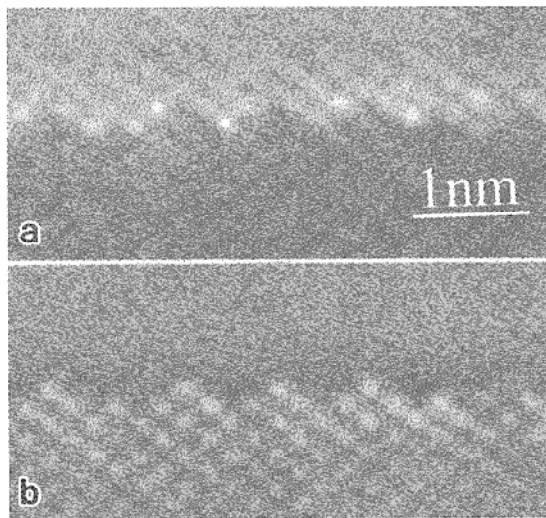


図2 (a) 通常の電子顕微鏡(電圧変調を実施しない場合)と
(b) 超電子顕微鏡(電圧変調を実施した場合)による金結晶表面の観察

位相差電子顕微鏡で観察した結果である。(a)の通常の電子顕微鏡像では球面収差の影響が像中に残存しているために正確な表面の断面形状を決定するのが困難であるが、(b)の超解像位相差像では球面収差の影響が補正されているため干渉縞のしみ出しがなく、金の(011)面の清浄表面構造である 2×1 原子列欠損型再構成構造がはっきり観察される。図3は4/30秒の時間間隔で金表面原子の移動をとらえた写真である。超解像位相差像では矢印で示した原子が一原子間距離移動していることを鮮明にとらえることができる。

球面収差補正された位相差像は、表面を形成している原子の正確な位置を決定できるだけでなく、原子の種別を決定する能力を兼ね備えている。近い将来

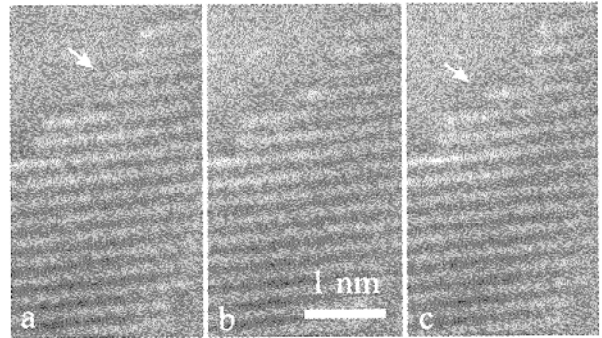


図3 金結晶表面原子の運動の動的観察(時間間隔4/30秒)

において表面に吸着した単分子をとらえて、触媒反応に関わる化学現象を議論できるようになるのも遠い話ではないかもしれない。また実時間で観察できる特徴を活かせば、表面や界面で起こるダイナミクスを原子レベルで観察することも可能になるであろうし、計算物理の手法を用いて一体何が原因で諸現象が起きているのかを予想することも可能になりつつある。またこの電子顕微鏡は無機物質だけでなく、生物試料の観察にも極めて有効に働く。炭素などの軽元素も位相差で観察することにより、これまでのように重原子等で染色しなくても、生体組織がありのままの姿で観察できるからである。

この他にも、新装置開発として、特性X線とエネルギー損失電子の同時検出を行うことで超低ドーズ電子線量で不純物元素分析できるコインシデンス電子顕微鏡、電界放出型カソードルミネッセンス電子顕微鏡、プラズマCVDその場観察用電子顕微鏡、演算機能を持つ新しいCCDカメラ、マイクロマニピュレーション機構を持つ集束イオンビーム装置、超低速イオン銃、生体観察用特殊雰囲気セルなど、世の中にない全くユニークな装置を開発中である。これらの装置の試作設計には、後に述べるコンピュータシミュレーション技術が生かされている。

2-2. 表面・界面物性の研究

① 金超微粒子の触媒機能発現に関する研究

金は化学的に極めて安定な物質として知られているが、粒子径が5nm以下の超微粒子になり酸化チタンの上に担持されると、低温でも高い活性を有する触媒となることが知られている。このような金の表面物性の著しいサイズ依存性、及び酸化チタンと金の接合界面の化学反応性を解明するために、金超微粒子の最表面や接合界面の構造を超電子顕微鏡を用いて解明している。これまでに得られた結果では、

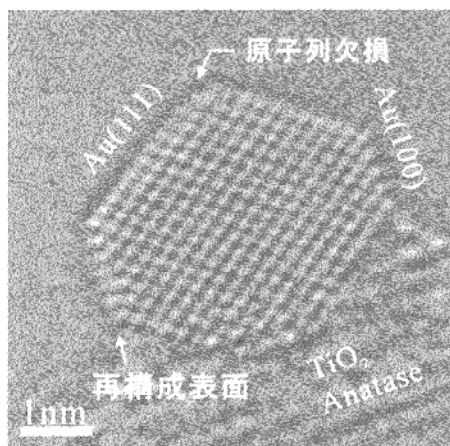


図4 超電子顕微鏡でとらえた金超微粒子

図4に示すように、微粒子は14面体構造を形成する 경우가多く、結晶面の交わる稜には原子欠損構造がみられること、最表面では本来の構造と違う原子配列が形成されている場合があることなどが明らかにされているが、どの特徴が触媒活性と密接な関係にあるのか分かっていない。私たちは観察された構造を用いて第1原理計算を行うことで両者の関係を明らかにし、触媒機能発現のメカニズムを探る研究を行っている。また顕微鏡内に雰囲気セルを導入し、実際のガス環境下で現象をとらえる実験的研究も開始している。

② 表面改質による新物質創成

原子サイズで結晶性や組成を制御して有用な物質を創成することは、かつては夢であったが、現在では、イオンビームを用いた技術や半導体プロセス技術により、表面系などの新物質相が作れるようになりつつある。私たちはイオンビームと蒸着技術を併用した技術を用いて結晶を制御した形で表面層を形成することに成功し、すでにこの技術は実用面でも耐腐食加工等に 응용されている。また計算物理の立場から固体表面で起こる現象の分子動力学シミュレーションを実行してより深く物理現象を理解し、得られた結果を実験にフィードバックさせて、より新しい機能性を持った表面層の創成を目指して研究している。コンピュータから新しい材料が生まれることも、そう遠い将来のことではないかもしれない。

2-3. 計算機シミュレーション

我々の研究室では、光、X線、電子線、イオンビームを用いて局所領域の原子構造や電子状態を実験的に調べると同時に、各種の計算機シミュレーションを独自に開発しその理論的解明を目指している。低

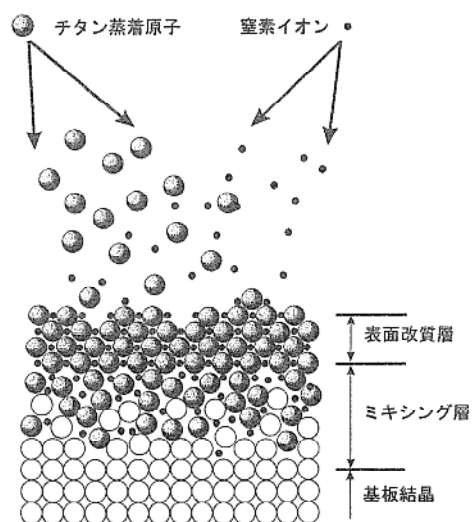


図5 イオンビームによる表面改質

速電子線回折や反射電子回折法による表面構造解析、オージェ分光法やイオン散乱分光法やX線光電子分光法による表面組成や表面電子状態の解析、電子やイオンの散乱と固体やガスとの相互作用の解析、電子波による像形成の計算、X線や2次電子の発生及び電子エネルギーロスのモンテカルロシミュレーションなどである。また電磁界計算により、電子ビーム光学系やイオンビーム光学系の設計を行い、独創的な装置開発に役立っている。

3. おわりに

我々の研究室は、これまでは主に無機材料を対象とした物性研究を行ってきた。これからは、物質・生命工学専攻にあって物理と化学と生物に跨る様々な対象に対し、新しい顕微鏡法や計測技術ならびに計算物理からの視点を加えながら、学際領域の研究を展開していきたいと考えている。自然が教えてくれる不思議な世界を学生たちと共に学び、学生たちが常に生き生きとしている研究室にしたいと思っている。

4. 文献

(1) Y.Taniguchi et al. : J. Electron Microsc. 41 (1992), 21
 (2) T.Ando et al. : Ultramicroscopy 54 (1994), 261
 (3) Y.Takai et al. : J. Electron Microsc. 48 (1999), 879