

平成 22 年 4 月 21 日現在

研究種目： 特定領域研究

研究期間： 2007 ~ 2011

課題番号： 19051002

研究課題名 (和文) 電子プローブによる構造と電子状態

研究課題名 (英文) Electron-beam analyses of crystal- and electronic-structures

研究代表者

寺内 正己 (TERAUCHI MASAMI)

東北大学・多元物質科学研究所・教授

研究者番号： 30192652

研究分野： 物性物理学 (実験)

科研費の分科・細目： 物理学・物性 I

キーワード： 解析・評価、電子顕微鏡、電子エネルギー損失分光、X線分光、収束電子回折

1. 研究計画の概要

我々が開発し世界をリードしてきた、電子顕微鏡法に基づいた 1) 収束電子回折 (CBED) 法による精密結晶構造解析法、2) 電子エネルギー損失分光法 / X 線発光分光法 (EELS/XES) による電子状態解析手法を、いち早くユビキタス元素のナノ空間配列物質群に適用し、「ユビキタス元素のナノ空間配列構造の精密構造解析とそれに伴う特異な電子状態の解明」を行う事が目的である。したがって、従来のマクロな測定からナノを議論してきたこれまでの新規材料開発とは異なった展開が本特定領域研究では期待できる。これらの応用研究を通して、「ナノスケール構造・物性解析手法の更なる高精度化」を行うことも目指す。

2. 研究の進捗状況

研究領域内の物質創製グループで作られた新物質に関し、電子ビームを用いた構造・電子構造の解析を行い、下記の結果を得た。

(1) ボロンナノベルト： CBED 法により構造の対称性を詳細に調べた結果、c 軸入射で期待された 4 回回転対称性観察されないだけでなく、場所により回折強度分布が異なることが明らかとなった。この事実は、X 線回折での平均構造解析から、サイト占有率が 100% でない、すなわち確率的に欠陥が分布しているというマクロ測定の結果と一致する結果が得られた。

(2) ゼオライト鑄型カーボン： EELS により炭素 K 殻励起スペクトルを測定した結果、炭素原子の sp^2 混成軌道によるネットワーク構造からなっていることが明らかとなった。また、XES の炭素 K 発光測定の結果、C60 結

晶と似た構造が価電子帯に存在することが明らかとなった。

(3) C60 ポリマー： XES の C-K 発光測定の結果、C60 分子の重合度が進むにつれて、価電子帯上端に位置する π バンドの状態密度分布に系統的な変化が生じていることが明らかになった。

(4) MgB4： EELS の価電子励起スペクトル測定から約 0.5eV にプラズモン励起が観測され、低密度キャリアーの存在が示唆された。EELS の B-K 殻励起スペクトルからは、伝導帯のエネルギー位置がボロン同素体に比べ約 1.8eV も低いことが明らかになった。XES による B-K 発光スペクトル測定より、価電子帯の上端のエネルギーが、他のボロン同素体とほぼ同じであることが判明した。これらの実験的事実より、エネルギーギャップの大きさを 0.6eV と実験的に見積もることに成功した。

これらの共同研究に基づく新規物質の構造・電子状態解析の他に、下記の電子顕微鏡では初めての試みである新規解析手法の実証実験に成功している。

(5) 角度分解軟 X 線発光分光： 単結晶領域の特定がよいであるという電子顕微鏡の特徴を生かし、単結晶領域からの角度分解 XES 測定をグラフィイトおよび六方晶 BN で行ったところ、 π 電子帯と σ 電子帯のエネルギーバンド部の分布を独立に抽出できることを示した。これにより、大きな単結晶が得られなくとも、価電子の異方性分布解析が可能であることを明らかにした。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している (理由)

特定領域研究の他のグループで合成した新規物質に関し、電子ビームを用いた構造・電子構造の解析を共同研究(10件程度)として行い、上記の4件の成果を得ている。また、独自に新たな解析手法の実証を行い、共同研究に利用できる準備も整った。

4. 今後の研究の推進方策

特定領域会議において、大気暴露できない新規試料の計測に対する要望が寄せられたことに対応するため、不活性ガス雰囲気を保ったまま試料トランスファー可能な実験設備の準備を進め、さらに、共同研究の幅を広げてゆく。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 17件)

1. Developments of wavelength-dispersive soft-X-ray emission spectrometers for transmission electron microscopes - an introduction of valence-electron spectroscopy for transmission electron microscopy -

M. Terauchi, M. Koike, K. Fukushima and A. Kimura

Journal of Electron Microscopy, 査読有, **59** (2010) accepted.

2. Soft X-ray emission spectroscopy study of the valence electron states of α -rhombohedral boron

M. Terauchi, Y. Sato, H. Hyodo and K. Kimura
Journal of Physics: Conference Series, 査読有, **176**, 012025 (2009).

3. Electron energy-loss spectroscopy and soft X-ray emission spectroscopy studies of electronic structure of boron nanobelts
Y. Sato, M. Terauchi, Z. Wang, Y. Shimizu, T. Sasaki, K. Kawaguchi, N. Koshizaki and K. Kimura.

Journal of Physics: Conference Series, 査読有, **176**, 012029 (2009).

4. A possible bucky bowl-like structure of zeolite templated carbon

H. Nishihara, Q.-H. Yang, P.-X. Hou, M. Unno, S. Yamauchi, R. Saito, J. I. Paredes, A. M. Alonso, J. M. D. Tascon, Y. Sato, M. Terauchi and T. Kyotani

CARBON, 査読有, **47**, 1220-1230 (2009).

[学会発表] (計 50件)

1. TEM-EELS/SXESによるナノスケール電子状態解析 (招待講演)

寺内正己、佐藤庸平: 応用物理学会 春季講演会シンポジウム、2010/3/17、東海大学

2. 高分解能 EELS による MgB_4 の電子構造の

研究

土谷公平、佐藤庸平、寺内正己、齊藤広樹、武田雅敏: 日本物理学会、2009/9/26、熊本大学

3. Study of crystal and electronic structures of boron nanobelt using convergent-beam electron diffraction and electron energy-loss spectroscopy

K. Tsuda, D. Morikawa, K. Iwasaki, Y. Sato, M. Terauchi, K. Kirihara, K. Kawaguchi, T. Sasaki, N. Koshizaki, H. Hyodo and K. Kimura: 15th International Symposium on Intercalation Compounds, 2009/5/14, Tsinghua University, Beijing, China.

4. TEM-XESによるゼオライトカーボンの電子状態の研究

寺内正己、西原洋知、京谷隆: 日本物理学会、2008/9/20、岩手大学

[図書] (計 0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]