The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	電界イオン顕微鏡（FIM）像のコンピューター・シミュレーション
Author(s)	山本，雅彦
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース．1973，10，p. 29-31
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65188
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

電界イオン顕微鏡（ＦＩＭ）像のコンピューター・シミュレーション

大阪大学工学部　山　本　雅　彦

合金固溶体と一口に言っても，その構造は単純なものではない。例えば，Ａ原子とＢ原子より成る固溶体を考えてみても，ある場合にはＡ原子ばかり集っているかも知れないし，またある場合にはＡ原子とＢ原子が仲よく規則的に配列しているかも知れない。更には原子空孔，格子間原子，転位といったような格子欠陥を含んでいるだろう。固溶体合金の構造が複雑であるからわからぬ，といって放置するわけにはいかない。何故なら，構造のちがい（欠陥構造も含めて）は，物理的・化学的・あるいは機械的諸性質のちがいとなってあらわれるからである。従って，多くの研究者によって，多くの研究手段を用いて，構造を明らかにするための研究が進められて来た。研究手段としては，Ｘ線回折，電子線回折，中性子線回折，メスバウアー効果，陽電子消滅，等々である。これらの研究手段の１つに電界イオン顕微鏡（ＦＩＭ）がある。ＦＩＭというのは，試料（針状）とスクリーン間に高電圧をかけ，わずかに導入した結像ガスを，試料表面上で電界電離させて（イオン化させて）スクリーン上に拡大投射させる顕微鏡である。その最大の特徴は金属原子を直接観察し得るほどの高い分解能をもっていることである。従って，他の実験手段とは異った独自の情報を提供する。原子レベルでの情報を提供してくれるのだから，固溶体合金の構造を研究する実験手段としては最適である。世界には，ＦＩＭを用いて，この種の研究をしているグループがいくつかある。我々はその一つのグループである。

ところで，ＦＩＭ像を得ても，その像の解析は容易ではない。どんな実験手段を用いても同じことが言えるが，種々の因子を考慮しなければならない。

ＦＩＭ像の解析を容易にする一つの方法は，コンピューター・シミュレーションの助けを求めることである。

1962年，Moore（メルボルン大）が面心立方格子と体心立方格子について，ＦＩＭ像として期待される像を，コンピューター・シミュレーションにより求め，その有効性を示して以来，シミュレーションは盛んに行なわれるようになった。

現在，ＦＩＭ像のコンピューター・シミュレーションには２つの方法がある。１つは Shell Model　法であり，他の１つは Bond Model 法である。Shell Model 法というのは，針状試料の先端の表面層（Shell）のみが結像に寄与すると仮定してシミュレーションする方法である。表面といっても原子レベルでみると凹凸があって，よく突き出ているところが電界電離しやすいだろうとの考えに立っている。従って，基本的には結晶の幾何学的要素のみ考慮していることになる。一方，Bond Model 法は，単に原子の幾何学的配列を考慮するのではなく，隣接原子を考えたとき，違った Bond をもっていると表面の局部的な電界や電子状態等に差違が生じて電界電離に影響するだろうと考え，Bond の強さを考慮して，像のシミュレーションを行なう方

法である。従って，Shell Model 法より Bond Model 法の方がより進んでいるといえるが，Shell Model 法の方が簡便であり，現在までのところ，ほとんどがこの方法によっている。

Shell Model 法によるＦＩＭ像のシミュレーションの普通の手順は次のように行なう。

(1) 結晶構造を設定し，（例えば今，体心立方構造を考えるのなら，体心立方構造を設定する。また，格子欠陥を含む場合を考えるのなら，それも含める）基本面（hkl）を決める。

(2) 針状試料（tip という）の先端を半円球と仮定し，半径（Ｒ）を決める。

(3) 電界電離を起すとする表面層（Ｐ）の厚さを決める。

(4) １番目の（hkl）面での原子１個１個について，（Ｘ座標とＹ座標を順次動かして）Shell （Ｐ）の内にあるか外にあるかを調べる。

(5) Shell 内にある原子のみ，その座標を記憶させる。

(6) １番目の（hkl）面が終ったら，次の（hkl）面にすすむ。同じ操作をｎ番目の面（ｎは任意に選んでよい）まで行なう。

(7) 記憶された（Ｘ，Ｙ）座標を希望する投影方法により投影するための座標の変換を行なう。

(8) ドラフターにて書く。

今までに，次のようなＦＩＭ像のコンピューター・シミュレーションの結果が報告されている。面心立方構造・体心立方構造・六方構造・六方最密構造の場合，体心立方構造に転位を導入した場合，最密六方構造に積層欠陥を含んでいる場合，面心立方構造で双晶を形成している場合，25・50・75 at ％の固溶体（不規則に配列している場合）について，Ｂ２型・LI_0 型・LI_2型・DI_a 型規則構造について，である。それぞれは実際に得られたＦＩＭ像と比較検討し，結像の様子や金属・合金固溶体の構造について多くの結果を導き出している。詳細は専門的になり過ぎるので省略する。

我々も，最近，ＦＩＭ像のコンピューター・シミュレーションをやってみた。我々が固溶体構造を調べるために扱っている合金の１つに Ni_4M_0 合金がある。Ni_4M_0 合金は不規則状態 で面心立方構造であり，規則化すると体心正方構造になる。この合金に関して，既に，規則・不規則変態の様子，規則化過程中に生じる領域構造等について，多くの実験結果を得ているが，（一例として，ほゞ完全に規則化した Ni_4M_0 合金のＦＩＭ像を第１図に示す。白点一つ一つが M_0 原子に相当する。）ＦＩＭ像のシミュレーションは多少やっかいである。それは，面心立方構造や体心立方構造とちがって，構造が少々複雑であることも一つの理由であるかも知れない。

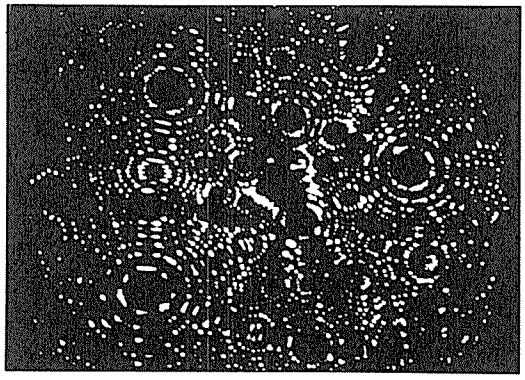
第２図は完全に規則化した Ni_4M_0 合金のＦＩＭ像のコンピューター・シミュレーションの結果である。これは大阪大学大型計算機センターのドラフターにより書かせて得たものである。Ｒ＝500unit，Ｐ＝0.075unit という条件を与えている。黒くぬりつぶしたのがNi原子，正 方形が M_0 原子に対応している。シミュレーションの結果と実際に得たＦＩＭ像とを比較検討すると種々のことがわかるが，この場合，Ni はほとんど結像に寄与せず，M_0 のみが寄与してい

ること，などがわかる。

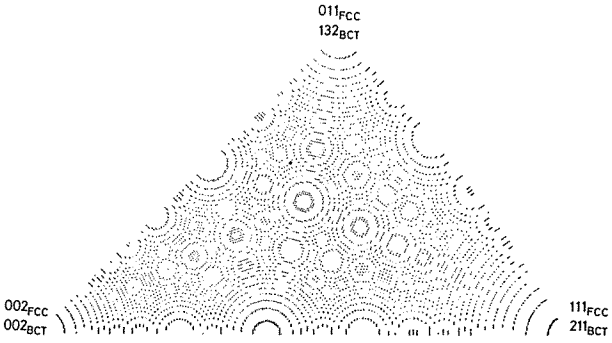
本稿依頼時にドラフター使用の感想も書いていただきたいとのことであった。我々は，最初他校のプロッターを用いていたが，プロッターとドラフターを同一に論じることは出来ないとはいうものの，図としての仕上がりは，阪大のドラフターの方がよい。また，直線，曲線は抜群に美しい。阪大のドラフターは，我々仲間には概ね好評である。

将来は，どんな複雑な構造でも，またどんな複雑な格子欠陥を含んでいる構造でも，そのＦＩＭ像のコンピューター・シミュレーションが出来るようになるだろう。更に，逆に，連続的に撮影されたＦＩＭ像より，原子レベルで３次元構造を再現し，グラフィック・ディスプレイしてみせる時代がやって来るだろう。

最後に，いつも親切に御指導いただいている稔野宗次教授，中村省吾教授，いつも議論していただいている中条　進氏に感謝の意を表します。また，この種のプログラミングに関して，いろいろお教え下さいました東京大学堂山研究室の石本清司氏（現：川崎製鉄）に厚くお礼申し上げます。



第 1 図



第 2 図