

EELS スペクトルの計算機シミュレーション  
Computer simulation of EEL Spectrum

京都大学 化学研究所 複合ナノ解析化学 根本 隆

研究成果概要

電子顕微鏡を用いて酸化鉄(ヘマタイト)結晶を高分解能観察すると、構造の一部に酸素欠損由来と考えられる周期的な縞模様が観察されることがある。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、Materials Studio を用いて欠陥部位の構造モデルの構築と当該部位における電子線エネルギー損失スペクトル(EELS)の解析を目的とした計算を試みた。

使用したソフトウェアは Materials Studio の CASTEP モジュールで、欠陥のない完全結晶のスーパーセルを元の構造として、一部の酸素原子を除去して構造最適化をかけることで、構造モデルを作成し、スペクトルの計算を試みている。

現時点では、実測のスペクトルを再現する構造モデルが得られておらず、解析が成功したとは言えない状況である。

原因として考えられる要素の一つとしては、試料中の電子線透過方向に対して無欠陥部位と酸素欠損部位が積層していることも考えられるが、観察されている酸素欠損部位の大きさから考えて影響は小さいと想定され、また、単純な信号の重畳では説明できないピークも見られている。

今後は詳細な電子顕微鏡像解釈により構造モデルをより正確に構築し、またスペクトル計算の条件を再検討するなどして、解析を継続していく予定である。

発表論文

なし