

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 複合ナノ解析化学領域 根本 隆

研究成果概要

走査透過型電子顕微鏡(STEM)法と電子エネルギー損失分光(EELS)法の組み合わせは、局所分析法としては非常に有用であり、様々な研究に用いられている。しかし、一方で様々な情報が重畳してスペクトルに現れるため、その解析には困難が伴い、様々な計算科学的手法によるスペクトル解釈が広く用いられてきた。近年では、電子顕微鏡の電子源にモノクロメータを組み込むことにより、エネルギー分解能の高い詳細なスペクトルが得られるようになってきており、従来は解釈が困難であった、吸収端微細構造の測定が可能となってきた。本研究においては、高エネルギー分解能 EELS スペクトルの解釈において試料原子の熱振動がスペクトルに与える影響について、主として VASP ソフトウェアを用いた解釈を試みている。

熱振動をフローズンフォノン法を用いて近似し、原子位置が熱振動により平衡位置からわずかにずれていると考えて、乱数により摂動を与えた構造モデルを多数生成して各構造に対応するスペクトルを計算によりシミュレートして平均化することにより、構造モデルから実験スペクトルを再現することを目標として計算を行った。

比較的小規模な計算を多数回行うため、1構造あたりの計算で使用する CPU を減らし、多数の構造について並列して計算を行うよう設定を行った。

現在は SrTiO_3 や類似酸化物結晶の Ti L edge について検討を進めているが、今のところスペクトルの再現度が十分でなく、原因の検討を行っている段階である。粉末 X 線回折法などによって解析された熱振動の文献値が文献により大きく異なっている問題もあり、データの信頼性の検討を行うとともに、熱振動パラメータについてもシミュレーションにより解析することも検討中である。

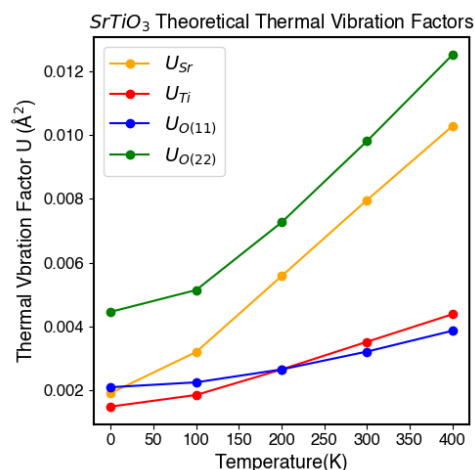


図 熱振動のシミュレーション結果