

## 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

EELS 法と電子顕微鏡を組み合わせは、ナノメートルスケールの局所分析に非常に有用な手法である。EELS 法のスペクトルには試料の電子構造にかかわるスペクトルも含まれており状態分析にも有用であるが、一方で、様々な信号が重畳してスペクトルを形成しており、詳細な解釈には計算科学的手法によるシミュレーションとの比較検討による解釈が必須となる。近年では光源にモノクロメータを挿入することで、結晶中の原子の振動解析の可能性も見えてきている。

本研究においては、SrTiO<sub>3</sub> 結晶中の酸素 K 殻励起スペクトルの微細構造に対する原子の熱振動の影響の検討を行った。

スペクトルの取得にはモノクロメータを搭載した ARM-200F 電子顕微鏡を用い、室温から 800°C の間で酸素 K 殻励起スペクトルの測定を行った。

計算機シミュレーションは、FEFF ソフトウェアを用い、格子の熱膨張のモデルと、熱振動による各原子サイトの摂動のモデルの二通りを行った。単純な熱膨張モデルでは、実験で得られたスペクトル変化の特徴は再現せず、スペクトル変化は原子間距離の変化だけでは説明がつかないことが明らかとなった。熱振動を考慮モデルは、フローズンフォノンモデル/アインシュタインモデルを用い、熱振動によって各原子サイトが平衡位置を中心にランダムに変位したと仮定して原子クラスターを構築し、各温度領域において 200-500 構造から計算したスペクトルの平均を計算スペクトルとして解釈を行った。

結果を図に示す。実験結果では 533 eV 付近の谷間の強度が特徴的な変化を示しており、それを再現する結果が得られたことから、この変化が熱振動に由来していると解釈できる。

現状ではスペクトルの再現度が低いため、モデルの改善を検討中である。

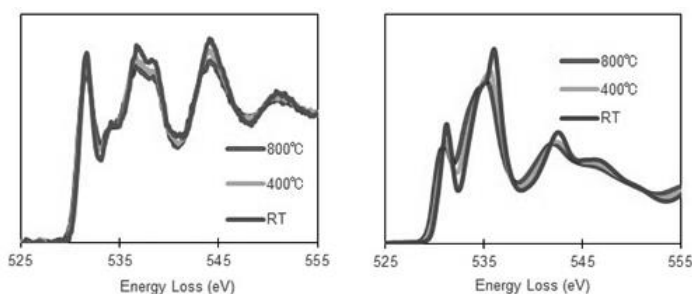


図 (左) 酸素 K 殻励起スペクトルの温度依存性 (右) フローズンフォノンモデルによるシミュレーション結果