

EELS スペクトルの計算機シミュレーション

Computer simulation of EEL Spectrum

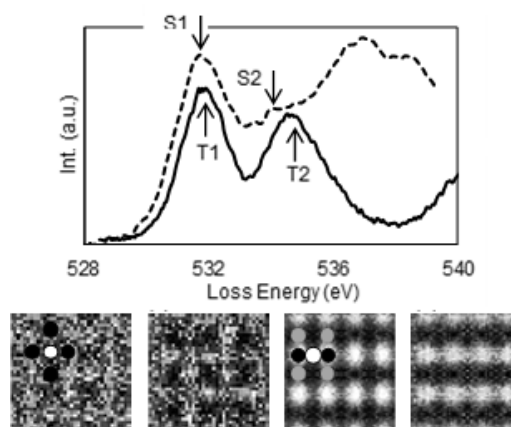
京都大学 化学研究所 複合ナノ解析化学 根本 隆

研究成果概要

走査透過型電子顕微鏡法(STEM 法)と電子エネルギー損失分光法(EELS 法)の組み合わせは、非常に高い空間分解能をもった分光法の一つであり、究極的には原子オーダーの分光を可能とする分光法である。EELS の測定では、試料中を透過する電子が試料中の電子を励起することによりエネルギーを失い、減速される。得られるスペクトルより試料中の電子の状態を推定することができ、低エネルギー領域に現れるプラズモン励起から数百 eV 領域の内殻電子の励起まで様々な情報が得られるが、一方でこれらの情報は重畳してスペクトルに現れるため、その解釈は単純ではなく、計算科学的手法による解釈が不可欠である。

本年度は、主としてペロブスカイト系の酸化物及びその類似物の解析を行っており、STEM-EELS 法によるスペクトラムイメージングという、各画素毎にスペクトルを取得する手法を用いて、異方性をもった軌道のマッピングを試みている。一例としては、チタン酸ストロンチウム(SrTiO_3)の内殻励起スペクトルを用いて、STEM-EELS 法による試料中の酸素原子の p 軌道の可視化を試みている(図)

測定点によって、各ピークの形状や強度は異なり、ピーク成分を分離して定量するために、第一原理計算による状態密度計算を行った。各電子の状態密度の計算を行い、実験的に得られた画像やスペクトルとの比較検討を行うため、WIEN2k 計算パッケージを用いた。計算用のデータの作成及び予備計算は研究室の計算機で行い、最も計算時間のかかる SCF 計算のみを京都大学化学研究所のスーパーコンピュータシステムを用いて行った。計算結果は現在解析中であり、岩清水らにより、日本顕微鏡学会学術講演会での発表を予定している。



酸素 K 殻吸収端の EELS スペクトルと高空間分解能のピーク強度のマッピングの例