

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 先端ビームナノ科学センター 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(STEM)法と電子エネルギー損失分光(EELS)法を組み合わせることにより、原子オーダーの局所構造、局所分析が可能であり、更に光源として単色化した電子源を用いることにより、エネルギー損失が数 meV の低エネルギー損失領域の分光が可能となってきた。この領域には分子振動や格子振動などに由来するスペクトルが得られる筈であるが、スペクトルには様々な情報が重畳され、その解釈においては、計算科学的手法を併用してモデルを構築することが必須となっている。

本年度は、主として有機金属錯体結晶を対象として、低エネルギー損失領域のスペクトルの解釈を行った。測定した対象は金属イオンを共有して配位した有機物がネットワークを形成しており、分子単体ではなく、結晶を対象とした第一原理計算による結晶中のフォノンの挙動の解析を目標とした。

計算は WIEN2k と Phonopy のソフトウェアを組み合わせで行った。

計算対象が有機物質であるため、対称性が低く、変数の多い計算となるのに加え、各原子座標に様々な方位で微小変位を加えて力場を計算することになるため、研究室の計算環境では半年間程度の計算が必要と見込まれたため、スーパーコンピュータシステムを使用した。計算にあたっては、研究室の計算環境で計算の初期パラメータの生成を行い、計算過程で最も時間のかかる SCF 計算の段階のみをスパコンで行った。各変位毎の計算は独立しており、APC キューを利用して 130 個の計算を順次実施した。計算時間は、実時間で約 2 週間であった。

右図に計算によって得られた低エネルギー損失領域の状態密度分布を示す。明瞭な分子振動由来のピークが再現できていることがわかる。

現在は、計算結果のとりまとめと詳細な解析を行っており、計算パラメータの調整などを実施している。

