

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

背景と目的

電子線エネルギー損失分光法(EELS)を走査型透過電子顕微鏡法と組み合わせることで、高い空間分解能で物質中の電子状態を局所分析することが可能であり、位置座標とスペクトルを対応づけたスペクトラムイメージングを行うことができる。EELS のスペクトルの低エネルギー損失領域には試料のプラズモン振動に対応するスペクトルが現れ、物質の電磁場に対する応答の空間分布を測定することが可能となるほか、様々な情報を得ることができる。しかし、これらの信号は複雑に重畳しており、その詳細な解釈にあたってはモデルの構築と計算機シミュレーションを組合せ、スペクトルの起源を明らかにする必要がある。詳細な解析に対応した計算負荷に対応するため、当スーパーコンピュータシステムの利用を試みている。

検討内容

本年は昨年に引き続き低エネルギー損失領域の解析を中心に検討を行った。試料を複数のダイポールで近似して表現する DDA 法を用い、試料近傍を通過する電子線のエネルギー損失を再現することで試料近傍を通過する電子線によるプラズモン励起確率の分布を求めた。

結果

絶縁体基板である酸化マグネシウム微粒子上に担持した様々な大きさ、形状の銀ナノ粒子を対象としたシミュレーションを行い、銀微粒子上に励起されるプラズモンの励起確率を求めた。電子顕微鏡像から構築したモデルを用いたシミュレーション結果は、実験で得られたスペクトルをよく再現しており、粒子の形状及び基板からの距離がスペクトルに大きな影響を与えていることが明らかとなった。

発表論文

なし

参考論文

投稿準備中