

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

電子顕微鏡法と電子エネルギー損失分光法を組み合わせることにより、nm オーダーの微小領域の構造観察と同時に局所領域の元素分析や電子構造の解析が可能となる。また、電子源を単色化するモノクロメータを併用することで、低損失エネルギー領域に現れる価電子励起や振動励起の情報を得ることも可能となる。しかしながら、電子線を局所領域に照射するため、試料の損傷が生じ、本来の状態とは異なる状態のスペクトルが得られることも多い。特に有機物の結晶では試料損傷が起こりやすく、損傷の影響を受けやすい振動スペクトルや価電子スペクトルの解析は困難である。このような試料のスペクトルの取得にはいくつかの手法が提案されており、今回は非弾性散乱の非局在性を用いて、試料に直接電子線を照射せず、試料近傍を通過した電子の損失エネルギーを解析する aloof 測定法によって得られた振動励起のスペクトルの解析を試みた。

本年度は、主として TCNQ および Ag-TCNQ を対象として、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムに導入されている Materials Studio の DMol パッケージを使用して振動励起のシミュレーションを行い、実験で得られたピークの帰属を行った。

1. DMol ソフトウェアを用い、X 線構造解析の結果を元に、分子構造・結晶構造の構造最適化を行った。Ag-TCNQ については、TCNQ アニオンラジカルについて計算した。
2. 構造最適化後、DMol ソフトウェアを用いて単分子、及び結晶としての振動解析を行った。

単分子では TCNQ のシアノ基は等価であるが結晶中では周辺環境の違いにより非等価である。しかし、計算により得られた振動モードはわずかに異なるエネルギー値を示すものの、結果として単分子の計算結果とほぼ同じ値となっていた。実験によって得られた振動励起のピークは 165 meV, 270 meV にあらわれており、それぞれ、C-C, C=C と C≡N の振動モードと推定される。これらの値は計算値や赤外吸収スペクトル法による文献値と良い一致を示しており、aloof EELS 法により、振動スペクトルの測定ができていると判断できた。