

EELS スペクトルの計算機シミュレーション

Computer simulation of EEL Spectrum

化学研究所 複合ナノ解析化学 根本 隆

背景と目的

走査型透過電子顕微鏡法と電子線エネルギー損失分光法(EELS)を組み合わせたスペクトラムイメージング法を用いると、高い空間分解能で物質中の電子の状態をマッピングすることが可能となる。EELS スペクトルのコアロス領域には元素の種別や状態が現れるほか、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。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による検証が不可欠であり、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

本年は低エネルギー損失領域の解析を中心に検討を行った。既存のプログラム DDEELS (N. Geuquet et al.) を用い、試料をダイポール近似して近傍を通過する電子線のエネルギー損失の再現を試みた。

2つの近接する金属ナノ粒子上のプラズモン励起分布の測定例はすでに存在するが、絶縁体基板上に担持した金属ナノ粒子の測定例はほとんどなく、絶縁体基板からの距離のプラズモン励起確率への影響を実験的に示すとともに、計算機シミュレーションを行った。

結果

酸化マグネシウム絶縁体基板上の銀ナノ粒子を対象とした実験結果は、粒子の基板側と真空側で異なるプラズモン励起確率を示しており、基板側の励起確率は明確に真空側より低くなっていた。シミュレーション計算は、光（電磁波）による励起と電子線入射による励起の2つのモデルで行った。この2つの励起過程の計算結果にはナノ粒子・基板間のプラズモン強度の違いがはっきりと現れており、光励起では基板側が強く、電子線励起では真空側が強くなっていた。EELS による測定結果と電子線励起モデルによる計算結果はほぼ一致しており、励起プロセスから考えて妥当な結果であった。

発表論文

なし

参考論文

投稿準備中