

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で、nm オーダーの微小結晶の構造を観察すると同時に局所領域の元素分析やバンド構造、イオンの価数の解析などが可能となる。更には、空間分解能を犠牲にするかわりに大きなカメラ長を設定することで、角度分解スペクトルの測定も可能である。しかしながら、電子エネルギー損失分光法で得られるスペクトルには様々な情報が重畳してして現れることから、その解釈は単純でなく、詳細な情報を解析する上では計算によるシミュレーションとの比較検討が必須である。

最終的なシミュレーションには主として WIEN2k ソフトウェアによる第一原理計算を主として行っているが、有機物結晶のスペクトルを計算する上では、その計算の元となる構造が問題となる。X 線結晶構造解析で得られる構造では、電子密度を元にした解析を行うため、水素原子の原子核位置と X 線解析で得られる電子密度中心が大きくずれるためである。そこで、WIEN2k による計算に先立ち、X 線構造解析結果をもとに、Materials Studio の DMol パッケージを主として使用して、構造最適化を試みた。

本年度は主としてフタロシアニン系の化合物を中心に構造最適化を行った場合と、行わなかった場合の比較を行った。

結果としては、予め構造最適化を行った場合のほうがより WIEN2k における計算が安定し、計算の発散が抑えられるとともに、より実験値と近い計算スペクトルが得られることが明らかとなった。

現在、より詳細な解析を行っており、結晶に対する電子線入射方位の影響の度合いなどについて実験値との比較検討を行っている。

発表論文

なし