

Une nouvelle technique pour calculée l'intensité de masquage des trous d'électrons est créée pour effectuer des simulations précises de la spectroscopie de perte d'énergie des électrons (spectroscopie EELS) des matériaux lithium. La méthode est appliquée pour vérifier la validité de conduire la spectroscopie EELS à 30 keV pour minimiser les dommages de la faisceau d'électron. Des spectres EELS sont calculés pour  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{LiF}$  et le lithium métallique et une meilleure concordance avec les résultats expérimentaux est reconnue pour tous les matériaux. Des meilleures caractéristiques quantitatives et prédictives sont aussi obtenues. La technique est basée sur la théorie de la réponse linéaire et relie la densité des électrons aux effets de masquage. Ces effets sont par la suite représentés avec un trou non-entière dans des calculations théorie de la fonctionnelle de la densité.