

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  
先端ビームナノ科学センター 複合ナノ解析化学領域  
根本 隆

研究成果概要

本研究では、プラズモン共鳴の EEL スペクトルの解釈を目的として、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用した計算機シミュレーションによる解析の試みを行った。計算モデルとしては、整列したダイポールと透過電子の相互作用を積算してスペクトルを求める DDEELS ソフトウェアの利用を試み、金属ナノ球体と隣接する絶縁体基板の近傍におけるスペクトルの位置依存性の計算を目標とした。使用したソフトウェア DDEELS は GPU にチューニングされておらず、GPU を利用するようコンパイルしても大きな速度向上がなかったため、今回はそれ以上のチューニングをおこなわず、APC Queue を用いて計算規模と計算時間の見積もりを行った。

計算内容としては銀ナノ粒子を 10,000 個-110,000 個のダイポールとして近似したモデルを使用した。

計算上必要とされたメモリはそれぞれ 18 GB – 900 GB に相当し、ダイポール数の 2 乗に比例したメモリが必要であった。研究室 PC での計算では 40000 ダイポール相当が上限であり、それを超える計算ではスーパーコンピュータシステムが必要となること、また計算時間もダイポール数の 2 乗に比例した計算時間となること、エネルギー軸で計算を分割することにより効率の良い計算が行えることが明らかとなった。

一方、今回試験に用いたモデルはシンプルなナノ粒子球体であり、ほぼ 10000 ダイポール以上を用いた計算結果の精度はほとんど変化しなかった。また、目的とする複雑な形状モデルに対する計算においてはより多数のダイポールによる近似が必要になると考えられるが、一方でメモリ上の制限が見えているためにそのまま単純に大きな構造モデルを作ることが難しく、大きな計算結果の改善が望めないことも明らかとなった。そのため、本年度はこれ以上の計算を断念してモデルおよび計算法の再検討を行うこととした。