

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 複合ナノ解析化学領域 根本 隆

背景と目的

電子線エネルギー損失分光法 (EELS) は電子顕微鏡と組み合わせることで、サブナノメートルオーダーの局所分析を行える手法として注目されている。EELS スペクトルには、試料構成元素に対応した損失エネルギーのピークが生じるだけでなく、電子線による励起過程に応じた情報がそのピークの微細構造として現れ、試料の電子構造などを局所的に解析することが可能となっている。また、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生じ、物質の電磁場に対する応答を検出することができる。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計算機シミュレーションとの比較検討が必須となっており、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.) を使い、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。DDEELS で最も計算に時間がかかる部分は方程式の解法の部分であり、MKL による逆行列計算を行う部分が計算時間の大部分を占めている。そこで、そのループの外側部分での並列化を試みるとともに、計算モデルの簡略化を試みている。

結果

本計算においては、2 万個前後のダイポールによる近似計算を行いたいと考えており、その場合、6 万 × 6 万要素の行列の計算を行うために一度に 30 GB 程度のメモリ量が必要となる。これを波長に対して並列化して計算することを考えているが、小規模な計算で試した結果、現実的な計算時間、メモリ量に収まりそうになく、計算条件の再検討を行っている。

現時点では、当スーパーコンピュータに適応するようにプログラムを書き直すことができていないことが一つの問題であり、十分に性能を生かすことができていない。今後はプログラムのチューニングとともに計算条件の最適化を行い、現実的な計算時間に収まる見込みが立ち次第、本格的な計算に入る予定である。

発表論文

なし

参考論文

なし