

受付 ID	15a-48
分野	物質科学

## 時間依存密度汎関数理論によるパルス光と物質の相互作用

### Time-dependent density functional theory for interactions between pulse light and matter

矢花一浩

筑波大学計算科学研究センター

#### 1. 研究目的

光科学のフロンティアの一つである、高強度超短パルスレーザーと物質の相互作用に関し、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算による研究の推進を目的とする。空間的に一様な電場が印加された結晶のブロッホ軌道関数の時間発展を記述する時間依存コーン・シャム方程式を実時間・実空間法により計算し、ポンプ・プローブ分光をはじめとする先端の光科学実験を模擬することができる、光電子ダイナミクスに対する新しいシミュレーション法の開発を進めてきた。さらに巨視的な空間スケールでの光伝播を記述するマクスウェル方程式と、原子スケールでの電子ダイナミクスを結合したマルチスケール・シミュレーション法を確立し、現在、多数の国内外の実験グループとの共同研究を推進している。これらの研究に必要なプロダクトラン遂行、及び高効率な計算コードの開発のため、本学際共同利用プログラムを利用する。

#### 2. 研究成果の内容

固体における電子ダイナミクスを定量的に記述する上で、バンドギャップを正確に再現する汎関数を用いることは極めて重要である。そのような汎関数として、ハイブリッド汎関数とメタ GGA と呼ばれるタイプの汎関数を用いた計算を試み、その成果を発表した(①)。また、COMA の Xeon-Phi プロセッサを有効に用いることができるよう、コード開発を行った。計算時間の主要な部分となるハミルトニアンを軌道関数に作用する際に現れるステンシル計算を、シンメトリックモードで遂行することにより、2倍近い加速を得ることが可能となった。

#### 3. 学際共同利用として実施した意義

HA-PACS 及び COMA という、特色のあるスパコンを同時に利用することが極めて有効であった。ハイブリッド汎関数を用いた計算では、非局所ポテンシャルを含む計算を HA-PACS の GPU を用いて加速することにより実行可能となった。また、ハミルトニアン演算において、COMA の Xeon-Phi を活用し、高速度な計算が可能となった。

4. 今後の展望

プロダクトランについては、非線形分極の起源を時空間で詳細に分析し、非線形光学分野での材料探索に有効となる手法の開発を行ないたい。また、炭素材料や2次元物質など、最近の光科学で強い関心を集めている物質群への応用を進めたいと考えている。コード開発に関しては、2016年度以降に運用が予定されている JCAHPC に設置されるスパコンを有効に活用する準備を進めたい。

5. 成果発表

(1) 学術論文

① S.A. Sato, Y. Taniguchi, Y. Shinohara, K. Yabana, J. Chem. Phys. 143, 224116 (2015).

② 廣川祐太、朴泰祐、佐藤駿丞、矢花一浩、情報処理学会論文誌、投稿中

(2) 学会発表

① Y. Hirokawa, T. Boku, S.A. Sato, K. Yabana, "Electron Dynamics Simulation with Time-Dependent Density Functional Theory on Large Scale Symmetric Mode Xeon Phi Cluster", The 17th IEEE International Workshop on Parallel and Distributed Scientific and Engineering Computing (PDSEC2016), 2016/5/27, Chicago, USA

② 矢花一浩、「第一原理計算によるレーザー加工初期過程解明への取り組み」、レーザー学会学術講演会第36回年次大会、2016/1/9-11、名城大学

③ K. Yabana, " Time-dependent density functional theory for strong laser pulses in dielectrics", Exploration of ultra-fast time scales using time dependent density functional theory and quantum optical control theory, 2015/9/28-10/2, CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

④ K. Yabana, " Time-dependent density functional theory for extreme nonlinear optics", Psi-K 2015, 2015/9/6-10, San Sebastian, Spain

⑤ S.A. Sato , K. Yabana, Y. Shinohara, K.-M. Lee, T. Otobe, G.F. Bertsch, "First-principles calculations for ultrafast laser-induced damage in dielectrics", CLEO 2015, 2015/5/10-15, San Jose, USA.

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS	○	400
HA-PACS/TCA		
COMA	○	1680
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		