

受付 ID	16a37
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

我々は、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て、時間依存密度汎関数理論(Time-Dependent Density-Functional Theory=TDDFT)に基づく第一原理計算を用いた研究を推進している。この研究では、Kohn-Sham 軌道の時間発展を実時間・実空間法を用いて計算し、線形応答から非線形電子励起、そしてポンプ・プローブ分光など、先端の光科学研究に関わる光電子ダイナミクスを記述するシミュレーション法の開発と応用を進める。さらに巨視的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に対する時間領域差分法(FDTD法)とマイクロなスケールの電子ダイナミクス計算を結合したマルチスケール・シミュレーション法を新たに確立し、パルス光と固体の相互作用に関する研究を進展させることを目的としている。

2. 研究成果の内容

本年度、2次元的な構造を持つ炭素物質であるグラファイトとパルス光の相互作用に関する研究を行った。まずはパルス光とグラファイトの相互作用を定量的に記述するために必要とされる空間格子や波数空間格子に関して収束性を確認した。グラファイトではその2次元的な構造を反映して、可視光以下の光吸収を精度良く記述するために、波数空間において特定の領域を細かくサンプルすることが必要となることが分かり、そのような非一様格子が利用可能となるよう計算コードの拡張を行った。その後、パルス光とグラファイトの非線形光吸収の特徴を明らかにするため、様々な強度、パルス長のパルス光から物質中の電子へのエネルギー移行を計算し、その系統的な振る舞いについて現在検討中である。

3. 学際共同利用として実施した意義

本課題では、独自に計算コードを開発する計算物質科学研究者と計算機科学研究者の密接な協力により進めている。Knights Corner プロセッサを持つ COMA を利用して計算を行っており、メニーコアマシンに最適化したコード開発を行い、その特徴

を活かした高効率な計算が可能となっている。この経験は、Oakforest-PACSを始めとする今後のメニーコアマシンを有効に活用する上で、大変重要なものとなっている。

4. 成果発表

(1) 学術論文

廣川祐太、朴泰祐、佐藤駿丞、矢花一浩、“電子動力学シミュレーションのステンシル計算最適化とメニーコアプロセッサへの実装”、情報処理学会論文誌コンピューティングシステム Vol.9、1-14 (2016)

(2) 学会発表

K. Yabana, “Maxwell + TDDFT multiscale description for interactions of intense pulsed light with dielectrics”, 7th Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications, Sept. 11-23, 2016, Benasque, Spain.

K. Yabana, “Time-dependent density functional theory for interactions of intense pulsed light with dielectrics”, KAIST Frontiers in DFT & Beyond Workshop, Aug. 16, 2016, Daejeon, Korea.

K. Yabana, “First-principles simulation for strong and ultra-short laser pulse propagation in dielectrics”, SPIE Defence+Security, Ultrafast Bandgap Photonics workshop, April 17-21, 2016, Baltimore, USA.

(3) その他

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS		
HA-PACS/TCA		
COMA	○	2914
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		