

|       |       |
|-------|-------|
| 受付 ID | 17a42 |
| 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 pulsed 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(TDDFT)に基づく第一原理計算による研究を行なっている。軌道関数の時間発展を実時間・実空間法を用いて計算し、先端の光科学研究に役立つ、光により生じる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ている。本年度は、吸収の強い金属薄膜とパルス光の相互作用を記述するため、マクスウェル方程式と時間依存コーン・シャム方程式を同一の空間スケールで連結した新しいシミュレーション法の開発や、固体中の電子ダイナミクスと原子のダイナミクスを同時に記述するエーレンフェスト分子動力学計算法の開発などに関する研究を進めることを目標とした。

#### 2. 研究成果の内容

マクスウェル方程式と時間依存コーン・シャム方程式を同一の空間スケールで同時に解くことにより、パルス光と吸収の強い物質の相互作用を第一原理から記述する新しいシミュレーション法の開発にほぼ成功した。現在、数 nm 程度のシリコンの薄膜によるパルス光の反射・透過・吸収などの振る舞いを調べている。いくつかの異なる厚さを持つ薄膜に対し、様々な振動数や強度を持つパルス光を入射した計算から、巨視的電磁気学による記述がどの程度の厚さまで有効か、また量子効果がどのような場合にどんな量に対して顕著となるのかといった基本的な光物性に関し、興味深い知見が得られつつある。

電子ダイナミクスと原子ダイナミクスの計算を組み合わせたエーレンフェスト分子動力学計算に関しても、ほぼ計算コードの実装は済んでいる。現在、シリコンやクロコン酸の結晶に対して計算を進めている。シリコンの計算では、反射プローブ光のスペクトル分解に関し、最近の実験結果と比較した研究を進めている。

3. 学際共同利用として実施した意義

Oakforest-PACS を始めとする最新のスパコンを利用することにより、大規模計算を前提とした新奇なシミュレーション法の開発を進めることができた。

4. 今後の展望

我々は、開発した計算コードを用いて独自の理論・手法による光科学研究を発展させるとともに、計算コードをオープンソースソフトウェア SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience, <http://salmon-tddft.jp>)として公開し、光科学の基盤的なシミュレーションソフトウェアとして発展させる活動を進めている。本年度開発した計算手法は、光・電子融合系における新奇なシミュレーション法として、未来の光科学研究の発展のために有用なものであると考えている。

5. 成果発表

(1) 学術論文

Y. Hirokawa, S.A. Sato, T. Boku, K. Yabana, Performance Evaluation of Large Scale Electron Dynamics Simulation under Many-core Cluster based on Knights Landing, Prof. of the 1<sup>st</sup> Int. Conf. on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2018), 183-191.

(2) 学会発表

K. Yabana, First-principles description for initial stage of femtosecond laser processing, CLEO2017, San Jose, USA.

K. Yabana, Ab-initio simulation for dynamics of electrons and light electromagnetic fields in dielectrics, NANO KOREA 2017, Ilsan, Korea.

| 使用計算機                       | 使用計算機<br>に○ | 配分リソース* |      |
|-----------------------------|-------------|---------|------|
|                             |             | 当初配分    | 追加配分 |
| HA-PACS/TCA                 | ○           | 56      | 0    |
| COMA                        | ○           | 153600  | 0    |
| Oakforest-PACS              | ○           | 416000  | 0    |
| ※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。 |             |         |      |