QED 真空および高温物性を解明するための数値計算

Numerical studies for QED vacuum and high-temperature material physics

柴田 一範

大阪大学 レーザー科学研究所

1. 研究目的

本研究の当初の目的は「量子電磁気学における光の計算」と、「密度汎関数法を用いた高温領域での物性計算」の2つの研究課題に関する合計3つのテーマであった。しかしながら、研究計画そのものの変更と共同研究の資金不足の問題から、後者の課題に関する高温領域での物性計算は断念することになった。前者に関しても、当初の目的であるコード開発よりも優れた研究テーマが設定されたため、そちらを行うことにした。

量子電磁気学における QED 真空の実証実験では、できるだけ高強度の電磁波を共振器に閉じこめる手法が有効であることが、代表者(柴田)などの研究で明らかになっている。そのため、「量子電磁気学における光の計算」の新しいテーマとして「高強度の光に耐えられる高反射率の鏡の設計」を設定し、これを実現するための計算を行った。高反射率の鏡の多くは多層膜で実現されており、その素材として SiO₂ がよく使われている。そこで本計算では、密度汎関数法(DFT)のソフトである SALMON を使用し、SiO₂ の物性や光学応答を計算した。とくに SiO₂ は準安定な構造が多くあるため、構造間の光学特性の比較を行った。

2. 研究成果の内容

SALMON で光学応答を調べる SiO₂ の構造として α -石英、 β -石英、 α -トリディマイト、 α -クリストバライト、 β -クリストバライト、の5つを考えた。いずれも常温で準安定な結晶である。各々の構造に対して基底状態を計算で求め、基底状態の計算結果を出発点として時間依存密度汎関数法(TDDFT)を用いて電磁波の入射に対する応答を計算した。その結果、各構造の誘電応答関数(テンソル)を得、また高強度・短パルスのレーザー入射における SiO₂ のエネルギー吸収がレーザーの波長、強度、パルス幅にどのような依存性をもつかを明らかにできた。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

SALMON などの DFT の計算プログラムは、多くのメモリを必要とし、また十分な並列化によって高速な演算が可能となっている。代表者が日常的に使用できる計算機を用いて SALMON の計算を行った場合、本プログラムと同一の計算結果を出すために

は半年以上計算機を占有する必要があると予想される。本プログラムの活用で研究の所要時間が大幅に短縮できた。また本プログラムでは研究テーマの変更を行っても計算機が使用できたので、研究の進捗に応じて柔軟に活用することができた。不確実性の多い研究テーマにとってこの柔軟性は非常にありがたい。また、wisteria は富岳と同じアーキテクチャーで作られているため、富岳用に最適化が施された SALMON の計算には非常に好都合な環境であった。

4. 今後の展望

2024 年度は新しく研究テーマを設定し直してからの活動だったので、多層膜鏡の素材として SiO₂ のみに着目して光学特性の計算を行った。高耐久・高反射率の多層膜鏡の設計には、TiO₂ などの他の材料の光学特性も必要である。最終的には複数の材料を積層したときの光学特性を解明することで、実際の多層膜鏡を製作する指針となる。そのため今年度以降は計算対象を SiO₂ 以外に広げていき、高耐久・高反射率の多層膜鏡の設計を可能にする知見を得たい。

5. 成果発表

(1) 学術論文

(2) 学会発表

2025 年 6 月に「光・量子ビーム科学合同シンポジウム」で発表予定

(3) その他

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus				
Pegasus				
Wisteria/BDEC-01	○	40000		
※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。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				