

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(TDDFT)に基づく第一原理計算による研究を推進している。軌道関数の時間発展を実時間・実空間法を用いて計算することをコアに持つ計算コード SALMON(Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience, <http://salmon-tddft.jp>)を独自に開発し、光科学分野に広く有用なオープンソースソフトウェアとして発展させ、アト秒科学や非熱レーザー加工など、先端の光科学研究に貢献することを目標としている。今年度は、薄膜と高強度パルス光の相互作用を、単一の空間スケールで光電磁場と電子ダイナミクスを結合する第一原理計算手法の開発と応用を行うこと、薄膜にパルス光が斜方入射する場合の、巨視的電磁気学とミクロな電子ダイナミクス計算を統合した計算を実現し、アト秒科学実験グループとの共同研究を推進することなどを主な目的として研究を行なった。

2. 研究成果の内容

薄膜とパルス光の相互作用に対して、電子ダイナミクスと光電磁場を単一の空間格子を用いて同時に解き進める新たな計算手法の開発に成功した。この方法をシリコンの様々な厚さの薄膜に対して適用し、光の強度が弱い場合に、数原子層からなる極めて薄い薄膜では従来から知られている2次元物質の取り扱いに一致すること、厚い薄膜の場合には誘電関数を用いた通常の巨視的電磁気学に一致すること、2次元と3次元の取り扱いの境となる厚さが5nm程度であることを明らかにした。また、光の強度が強い場合には、極めて薄い薄膜に対しては新たな手法を提案し、厚い薄膜に対してはこれまで我々が提案してきたマルチスケール計算手法と一致する計算結果となることを示した。これらの結果から、本研究で開発した手法が、単原子層からバルク物質に至る様々な厚さの物質に対して、そして光の強度によらず適用可能な汎用のシミュレーション手法となっていることを確認した。

また、斜方入射する高強度パルス光と物質の相互作用に対するマルチスケール計算手法に対して、光電磁場を1次元的に扱う新たな手法を開発した。これにより、高強度パルス光が斜方入射する場合の第一原理計算が可能となり、同じ条件で行われてい

る実験とも良好な一致を示していることを確認している。今後さらに、メカニズムの分析などを進め、論文をまとめる予定である。

3. 学際共同利用として実施した意義

本研究は極めて大規模な計算機リソースが必須となるため、学際共同利用で利用可能となるスーパーコンピュータの利用なしには遂行できない課題であった。学際共同利用による、特に Oakforest-PACS の利用は極めて有用であった。

4. 今後の展望

さらに多様な光と物質の相互作用に対して時間依存密度汎関数理論による記述を発展させ、光科学の発展に貢献するとともに、開発した計算コードをオープンソースソフトウェア SALMON として整備し、分野の基盤的なソフトウェアとなるよう発展させたいと考えている。

5. 成果発表

(1) 学術論文

S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, K. Yabana, “Time-dependent density functional theory for interaction of ultrashort light pulse with thin materials”, *Phys. Rev. B* **98**, 245147 (2018).

(2) 学会発表

K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, “Ab-initio large-scale simulation for initial stage of laser damage in transparent nano-materials”, 3rd Smart Laser Processing Conference 2018, April 24-28, 2018, Yokohama, Japan.

S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, K. Yabana, “Microscopic and macroscopic descriptions for interaction of ultrashort light pulse with thin materials”, *Int. Symp. on ab-initio electron dynamics simulations*, Nov. 14-16, 2018, Tsukuba, Japan.

S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, K. Yabana, “Microscopic and macroscopic Maxwell-TDDFT descriptions for light-matter interaction in thin materials”, *APS March meeting 2019*, Mar. 4-8, 2019, Boston, USA.

K. Yabana, “First-principles calculation for propagation of strong laser pulse with dielectrics”, *Int. Symp. on ultrafast electronic and structural dynamics*,

Mar. 7-8, Tohoku Univ. Japan.

矢花一浩、”物質科学分野における高強度パルス光を用いた研究の現状と展望～理論・計算物理からの視点～ “、日本物理学会第74回年次大会シンポジウム、3/14-17 2019、九州大学

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
COMA	○	94,000	
Oakforest-PACS	○	470,000	
※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。			