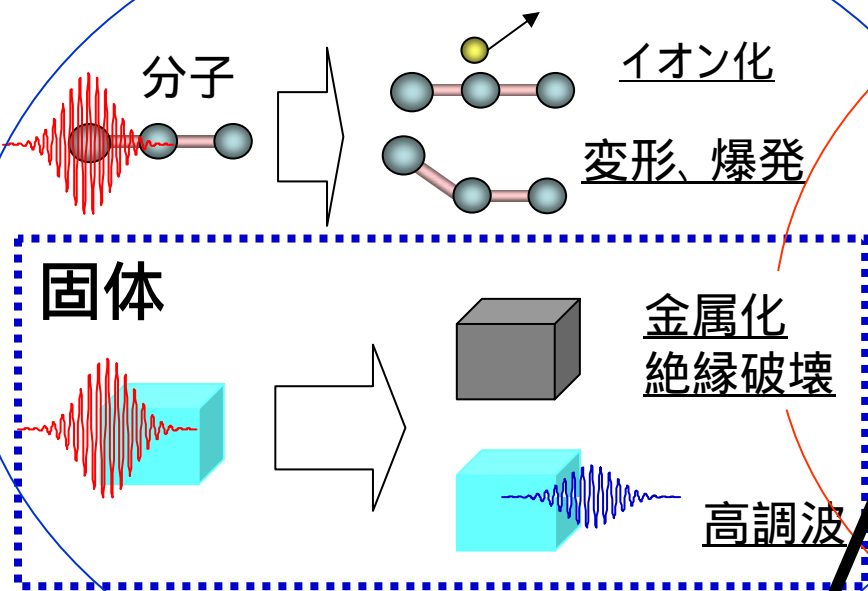


大規模並列計算による多電子系非線形ダイナミクスの量子的記述 分子から固体まで

大強度レーザーと多電子系の相互作用

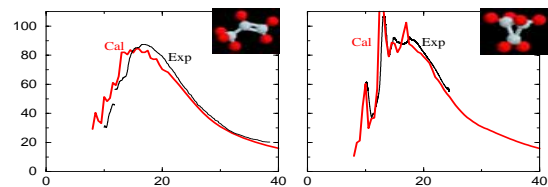


計算科学によるアプローチ

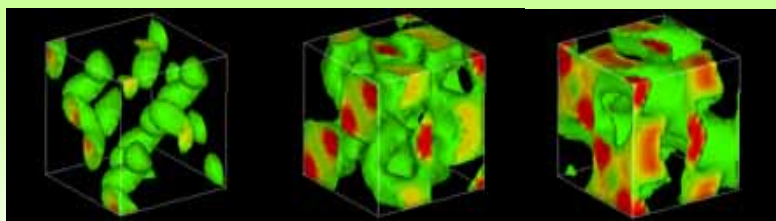
時間依存密度汎関数法の
実時間・実空間法による計算

実時間法: 実際に時間発展を追う
電子励起やダイナミクスを記述

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{nk}(t) = h_{KS}[n(\vec{r}, t)] \psi_{nk}(t)$$



例
T.Nakatsukasa &
K. Yabana,
Chem. Phys. Lett.
374 (2003) 613



時間発展

レーザーによる透明素材の励起過程

励起電子のプラズマ振動、
伝導帯の占有電子の分布
多光子吸収からトンネルイオン化への変化
etc.