

# 実時間-実空間法による電子-イオンダイナミクスの大規模並列計算

筑波大学 数理物質科学研究科 博士後期課程1年 川下 洋輔

## 電子ダイナミクス

量子論的な記述  
時間依存密度汎関数法

実時間発展法 実空間法

## イオンダイナミクス

ニュートン力学による  
分子動力学(MD)



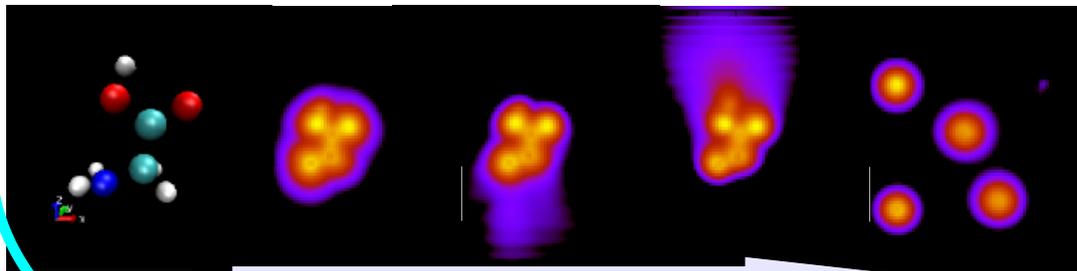
ナノメートルサイズ、フェムト秒スケール  
ダイナミクスの第一原理的な記述

様々な応用  
(光化学反応、ナノワイヤーの電気伝導、レーザーによる分子コントロール、...)

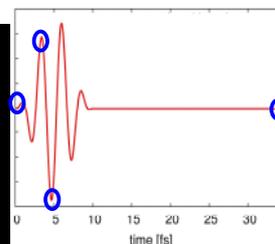
計算例：強レーザーパルスによる多重イオン化とクーロン爆発

アミノ酸 (グリシン)

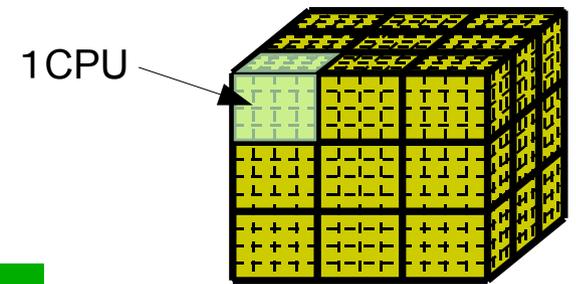
電子密度の時間発展



TIME



## 空間分割による効率的な 大規模並列計算



サイズスケーリング： $O(N^2)$  / CPU数  
計算：通信の比率はCPU数によらず一定  
= 3 : 1 (筑波大 PACS-CS)

ペタフロップス級  
スーパーコンピュータで...

例：生体分子での  
電子-イオンダイナミクス

XFELにおけるタンパク質  
光応答のシミュレーション