

実時間-実空間法による分子ダイナミクスの第一原理シミュレーション

川下洋輔¹, 中務孝^{2,3}, 矢花一浩^{1,3}

¹筑波大 数理物質科学研究科, ²理研 仁科センター, ³筑波大 計算科学研究センター

電子ダイナミクス

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(\vec{r}, t) = \left\{ h_{KS}[\rho(\vec{r}, t), \{\vec{R}_a\}] + V_{\text{ext}} - iW_{\text{ABC}} \right\} \psi_i(\vec{r}, t)$$

時間依存密度汎関数法

量子論的

実空間法

実時間法

イオンダイナミクス

$$M_a \frac{d^2 \vec{R}_a}{dt^2} = \vec{F}_a(\rho(\vec{r}, t), \{\vec{R}_a\}) + \vec{F}_{\text{ext}}(t)$$

ニュートン方程式 古典的

電子ダイナミクスとの結合



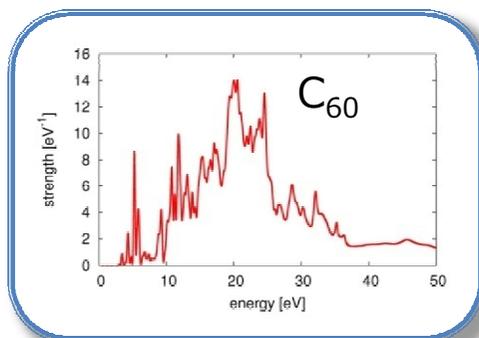
ナノサイズ物質の光応答に対する第一原理的な記述

応用例

空間分割による
効率的な並列化

$$V_{\text{ext}} = zk\delta(t)$$

光吸収強度



$$V_{\text{ext}} = \sin^2(2\pi t/T) \sin(\omega t)$$

レーザーパルス下の分子ダイナミクス

C₆₀

