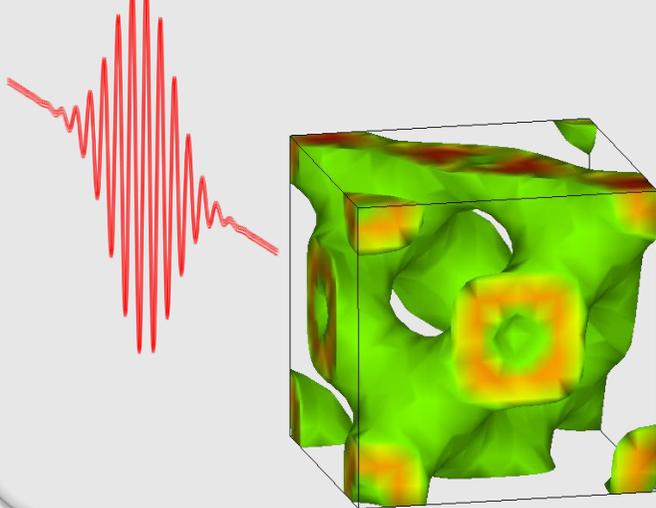


篠原 康¹、矢花 一浩^{1,2}、川下 洋輔¹、岩田 潤一²、乙部 智仁³
 筑波大学数理物質科学研究科¹、筑波大学計算科学センター²、JAEA³

対象と計算手法

パルスレーザーと固体の相互作用の
実時間第一原理シミュレーション



3種の自由度の実時間ダイナミクス
 ・電子系：TDDFT (実時間法、実空間法)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{n,\mathbf{k}} = \left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}(t))^2 + V \right] \psi_{n,\mathbf{k}}$$

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(t + \Delta t) \cong \sum_j \frac{1}{j!} (-i\hbar_{KS}[\rho(t)]\Delta t/\hbar)^j \psi_{n,\mathbf{k}}(t)$$

・イオン：古典力学

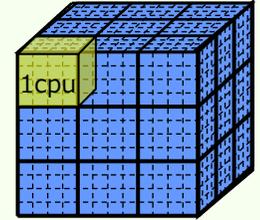
$$M_a \ddot{\mathbf{R}}_a = \mathbf{F}[\rho(t), \{\mathbf{R}_a\}; t]$$

・電磁場：古典電磁気学

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}(t)}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}[\rho(t)]$$

並列化手法

k空間における並列化



k-space

T2K-Tsukuba(512CPU)
 の計算において通信時間は
 計算時間の**2.44%**

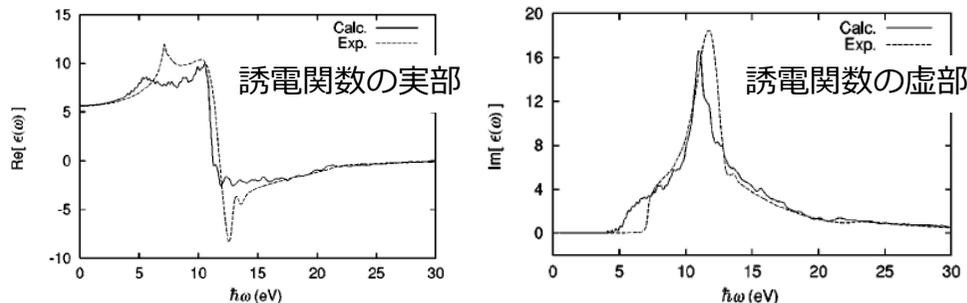
非常に高効率な並列化手法

応用例

線形応答：誘電関数

デルタ関数型の外場に対する固体の実時間計算

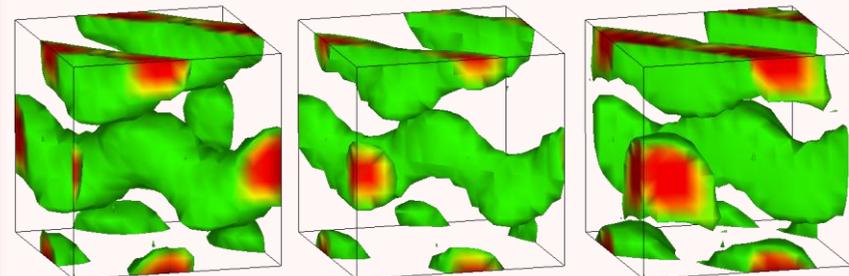
$$V_{ext} = V_0 \delta(t)$$



G. Bertsch, J. Iwata, A. Rubio, K. Yabana, PRB 62, 7998(2000)

非線形現象：コヒーレントフォノン

パルスレーザー下の固体の実時間計算



レーザー照射後の基底状態からの密度の変化 (シリコン)

時々刻々の電子状態がイオンに及ぼす力を計算

コヒーレントフォノン生成機構の解明