

新たな光機能や光物性の発現・利活用を基軸とする
次世代フォトニクスの中盤技術
平成 28 年度採択研究代表者

H28 年度 実績報告書

矢花 一浩

国立大学法人筑波大学 計算科学研究センター
教授

光・電子融合第一原理ソフトウェアの開発と応用

§ 1. 研究実施体制

(1)「筑波大」グループ

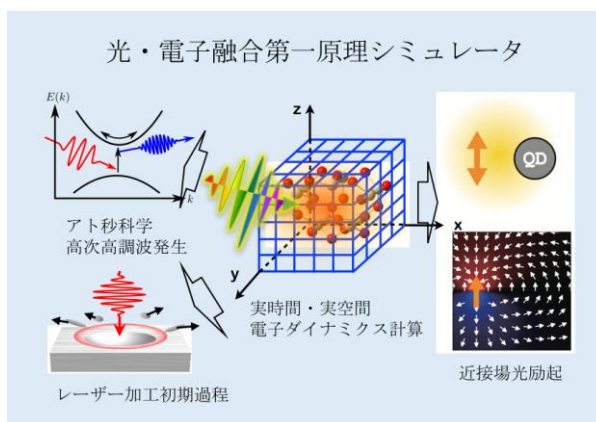
- ① 研究代表者：矢花 一浩（筑波大学計算科学研究センター、教授）
- ② 研究項目
 - ・パルス光と固体の相互作用を記述するソフトウェアの開発
 - ・固体中の超高速電子ダイナミクスを伴う現象の解明

(2)「分子研」グループ

- ① 主たる共同研究者：信定 克幸（分子科学研究所、准教授）
- ② 研究項目
 - ・パルス光とナノ構造体の相互作用を記述するソフトウェアの開発
 - ・近接場光を用いた新奇光励起ダイナミクスの解明

§ 2. 研究実施の概要

我々は、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算の方法を用いて、極めて短いパルス光を物質に照射した時に、その照射中や照射直後に起こる物質内部での電子の運動を、アト秒の時間とナノメートル以下の空間解像度で記述する計算方法を発展させ、計算プログラムの開発を行っている。本研究では、開発した計算プログラムを用いて、高強度超短パルスレーザーと物質との相互作用や非熱レーザー加工初期過程、近接場光による非局所励起過程の解明を行うとともに、計算プログラムをオープンソースソフトウェアとして発展させ、実験や企業の研究者にも役立つものとするを目的としている。本年度は以下に述べる発展があった。



(1) 光・電子融合第一原理ソフトウェアの開発

これまで筑波大グループはパルス光と固体の相互作用を記述するプログラムを、分子研グループはパルス光と孤立したナノ構造体の相互作用を記述するプログラムを発展させ、それぞれオープンソースソフトウェアとして公開している。ソフトウェア開発の今後の進め方に関し、一つのプログラムで孤立系(分子やナノ構造)から周期系(固体)まで扱え、さらに表面の問題や1次元・2次元物質まで対象とすることを目指して、筑波大と分子研のプログラムを融合する方針を決定し、入力ファイルの設計や開発環境の統合を進めた。

(2) パルス光と固体の相互作用

筑波大グループでは、固体と高強度なパルス光の相互作用で起こる様々な非線形電子励起過程を解明するため、計算コードの改良と結果の分析を進めている。グラフェンやグラファイトなどの2次元物質を効率的に扱えるよう計算コードの改良を行うとともに、光渦などの先端のレーザー光と固体表面の相互作用、パルス光と3次元的なナノ構造の相互作用を記述する、光電磁場と電子のダイナミクスを多階層連結する計算方法を開発した。

(3) 近接場光励起

分子研グループでは、近接場光とナノ構造体の相互作用に起因する新奇な光励起ダイナミクスを明らかにするための数値計算プログラムの開発と改良を進めている。具体的には、近接場光の空間的な非一様性を取り込んだ光と物質の相互作用を記述するためにプログラムの改良を行い、ワイドバンドギャップを持つ物質の可視光励起や間接バンドギャップ型半導体の直接的な光励起を扱うための数値計算プログラムの開発を行った。