

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基盤技術
平成 28 年度採択研究代表者

H29 年度 実績報告書

矢花 一浩

国立大学法人筑波大学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
 - ・第一原理光科学ソフトウェア SALMON 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 (自然科学研究機構分子科学研究所、准教授) (平成 30 年 1 月 15 日まで)
飯田 健二 (自然科学研究機構分子科学研究所、助教) (平成 30 年 1 月 16 日から)
- ② 研究項目
 - ・第一原理光科学ソフトウェア SALMON 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

今日の先端の光科学では、従来の電磁気学に基づく光電磁場解析計算や、物質科学の第一原理計算による誘電関数の記述では対応できない、光電磁場と物質中の電子のダイナミクスが強く結びついた現象に、基礎と応用の両面で大きな興味を持たれている。本研究は、時間依存密度汎関数理論による電子ダイナミクスの第一原理計算と、光電磁場を記述するマクスウェルの方程式、そして原子の運動を記述するニュートンの運動方程式を結びつけた新しいシミュレーション法を開発し、アト秒科学や近接場光励起などの先端の光科学実験の解析に応用して光科学の発展に貢献するとともに、開発したソフトウェアを実験や企業の研究者にも役にたつものとして発展させることを目指している。今年度は次のような活動を行なった。

(1) 光・電子融合第一原理ソフトウェア SALMON の開発

これまで、筑波大グループが中心となり開発を進めてきたパルス光と固体の相互作用を記述するプログラムと、分子研が開発を進めてきたパルス光と分子やナノ構造体の相互作用を記述するプログラムを統合し、汎用の光・物質相互作用に対するシミュレーション・ソフトウェア SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) を開発し、ウェブページ



<http://salmon-tddft.jp> において公開した。統合にあたり、Fortran の namelist 機能を用いた入力ファイルとし、CMake を用いたビルド手法を採用するなど、使いやすいソフトウェアとするよう配慮した。また多くの研究者に SALMON の利用を促すため、講習会の開催や広報に努めた。

(2) パルス光と固体の相互作用

筑波大グループでは、固体にパルス光を照射した時に発生する高次高調波発生に関し、その固体中の伝搬を取り扱う理論計算を行い、伝搬効果を考慮することが明瞭な高次高調波スペクトルを得る上で重要であることを明らかにした(I. Floss et.al, “Ab initio multiscale simulation of high-order harmonic generation in solids”, Phys. Rev. A97, 011401 (2018).)。また、金属などの表面光応答や2次元物質の光応答を記述するため、光電磁場と電子ダイナミクスを単一の空間スケールで同時に記述する新たな手法の開発を進めた。さらに、光の照射による電子励起がイオンに及ぼす力を求め、イオンの運動をニュートンの運動方程式により記述する分子動力学計算コードを実装し、光・電子・イオンの三者を同時に記述できるよう計算コードを整備した。

(3) 近接場光励起

分子研グループは、近接場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計算プログラムの開発と現象の解明を進めている。近接場光励起では、通常的光励起では選択則で禁止される遷移が許容されるため、その特徴を活かした新奇な光励起ダイナミクスとして、波数励起や二倍波励起の解明を進めてきた。本年度は実験グループとの協力により、酸化チタンの表面に近接場を照射することで、酸素解離の閾エネルギー以下でエッチングが可能

となることに関し、SALMON を用いたシミュレーションを行いそのメカニズムを明らかにした(T. Yatsui et.al, “Effects of a power and photon energy of incident light on near-field etching properties”, Appl. Phys. A(2017) 123:751.). また、3次元的な電磁場解析の汎用コードを開発し、SALMON において、通常の FDTD 法による電磁場解析から先進の第一原理光電子ダイナミクス計算まで一括して記述が可能となるよう、計算コードの整備を進めた。