

# アト秒パルスレーザーを用いた固体光応答の第一原理シミュレーション

矢花一浩：筑波大学計算科学研究センター

われわれは、光科学研究のフロンティアで求められる光と電子が密接に結合した系の相互作用を物質科学の第一原理計算から出発して記述する、新しい光科学シミュレーション法の開発を行っている。開発した計算プログラム SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) は、オープンソースソフトウェアとして公開している (<http://salmon-tddft.jp>)。われわれは、SALMON が光科学の幅広い研究者にとって有効で国際的に流通する基盤的ソフトウェアとなることを目標に、開発を進めている。

われわれの計算のコアとなるのは、パルス光の電場により物質中に誘起される電子のダイナミクスに対する実時間・実空間計算法を用いた第一原理計算である。われわれはさらに、電子ダイナミクス計算を電磁場解析の方法を結びつけ、第一原理計算に基づく電磁場解析を実現している。このような計算科学による研究は他に例がなく独創性の高いものとなっている[1]。

SALMON が有用となる先端光科学研究の一つが、アト秒科学や非熱レーザー加工などを含む高強度超短パルスレーザーと物質の相互作用を用いた基礎・応用研究である。これらの実験研究は、大学・研究所などの研究室レベル、そして XFEL などの大規模施設において行われている。最近ペタヘルツで動作する未来の新奇な光デバイス実現に向けた基礎研究として、数サイクルの高強度パルス光と固体結晶との相互作用が興味を集めている。われわれは欧州のアト秒科学実験グループと密接な連携を行い、この研究に取り組んでいる[2,3]。図1に光電磁場と電子のダイナミクスを同時に記述する多階層シミュレーションの手法を模式的に示す。図2はこのシミュレーション法を用い、ダイヤモンドの光応答がパルス光の1周期よりも短い時間で変化する様子を初めて捉えた実験と、計算による解析結果を示している[3]。

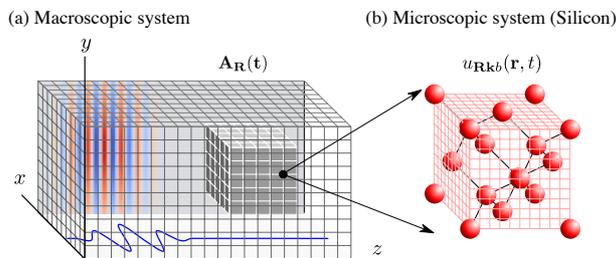


図1：光電磁場と電子のダイナミクスを同時に記述するマルチスケール第一原理計算の概要。左は光電磁場を記述する巨視的格子点、右は電子ダイナミクスを計算する微視的格子点。

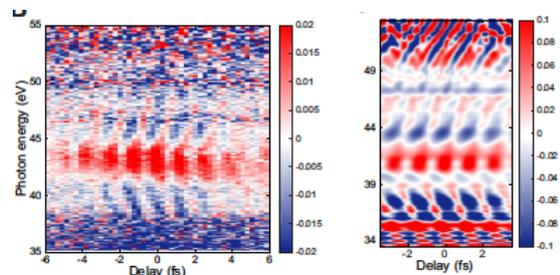


図2：ダイヤモンドの光応答がフェムト秒以下の時間スケールで超高速変化することを示す図。左は実験（チュールリッヒ工科大学）、右は我々のシミュレーション[3]。

## 参考文献

- [1] 矢花一浩、他；固体物理 52, 139 (2017).
- [2] A. Sommer et.al; Nature 534, 86 (2016).
- [3] M. Lucchini et.al; Science 353, 916 (2016).

## 関連 web

<http://salmon-tddft.jp>