

光量子科学連携研究機構 (UTripl) セミナー  
光量子科学研究センター (PSC) セミナー・フotonサイエンス研究機構 (IPST) セミナー  
コヒーレントフォトン技術によるイノベーション拠点 (ICGPT) セミナー  
先端レーザーイノベーション拠点 (ALICE) セミナー  
東京大学統合物質科学リーダー養成プログラム (MERIT) セミナー  
最先端融合科学イノベーション教育研究コンソーシアム (CIAiS) セミナー  
TACMI コンソーシアム オープンセミナー

# TDDFT による第一原理電子ダイナミクス計算と ナノフォトニクスへの適用に向けて

植本 光治 氏

筑波大学計算科学研究センター

日 時： 2019年7月1日(月) 16:00～17:00

場 所： 東京大学工学部3号館2階31講義室(221号室)

## 【概要】

我々はこれまで、第一原理時間依存密度汎関数法(TDDFT)と電磁界計算をハイブリッドさせた、独自のマルチスケール計算手法の開発を進めており、本講演では、高強度レーザーパルスの半導体中の伝搬シミュレーションについて紹介する。最近、同手法の2～3次元系や斜方入射への拡張を行い、シリコンの薄膜・ナノ構造体(球体およびナノギャップ構造)の光応答について、スーパーコンピュータ「Oakforest PACS」による大規模計算を行った。

たとえばナノ球体(3次元)の場合、比較的弱い強度( $I=10^{10} \text{W/cm}^2$ )のレーザーに対しては、球面屈折により焦点上への集光が確認できる。高強度になるにつれ( $I \sim 10^{12} \text{W/cm}^2$ )、焦点上での電子励起によるキャリア生成が進行し、吸収・散乱のパターンに強度依存性が現れる様子が観察された。また、本講演では最近行っているマルチスケール計算の進展状況についても紹介する予定である。

使用言語：日本語

紹介教員：石川顕一 教授(工学系研究科原子力国際専攻)

本件連絡先：psc-office@psc.t.u-tokyo.ac.jp

※本セミナーはオープンですが、記録のため参加者のお名前、ご所属を当日ご記入いただきますのでご了承ください。