

O-05 矢花 一浩

筑波大学計算科学研究センター

e-mail: yabana@nucl.ph.tsukuba.ac.jp

1987年 京都大学大学院理学研究科物理学第二専攻修了

1988年 新潟大学理学部助手

1994年 新潟大学理学部助教授

1999年 筑波大学物理学系助教授

2002年 筑波大学大学院数理物質科学研究科教授

2004年 筑波大学計算科学研究センター教授



フェルミ多粒子系ダイナミクスのシミュレーション

量子力学に支配される物質の構造やダイナミクスに対して、密度汎関数理論に基づく非経験的な記述が様々な分野で発展している。本発表では、発表者が長年にわたり携わってきた、時間依存密度汎関数理論に基づくフェルミオン多粒子系の量子ダイナミクスに対する記述の発展を、原子核（核子多体系）と物質科学（電子多体系）を対比しつつ紹介したい。

3次元的な多フェルミオン系のダイナミクスに対するシミュレーションは、原子核物理の分野で1970年代の後半に始まった。線形応答理論と組み合わせた巨大共鳴状態の解明や、初期値問題としての重イオン衝突現象への応用が行われ、今日でも原子核ダイナミクスを徹底的に調べる方法として中心的な役割を果たしている[1]。

1980年代に入るとナノ科学の分野が創出され、有限量子多体系として類似する原子核物理の様々な手法が応用された。その中で私は、原子核物理分野で発展していた量子シミュレーションの方法を物質科学の第一原理計算の方法と結びつけることにより、電子ダイナミクスに対する第一原理シミュレーションの方法を発展させた。線形応答理論と組み合わせたこの方法は、時間依存密度汎関数理論を用いた電子励起や光応答計算の手法の一つとして、今日様々な物質科学ソフトウェアに実装されている。

原子核物理学において時間依存密度汎関数理論は、線形応答による光応答に加え、基底状態から大きく離れた大振幅な量子ダイナミクスである原子核衝突に応用されている。物質科学の分野でこの大振幅な量子ダイナミクスに対比されるものとして、高強度パルスレーザーと物質の相互作用の解明がある。固体に高強度なパルスレーザーを照射すると、著しく非線形な電子励起が引き起こされる。物質を破壊する強度ではこの反応は非熱的なレーザー加工技術に関係し、それよりも弱い強度では新奇な光デバイスのメカニズムをもたらすことが期待され、盛んに実験が行われている。このような高強度パルス光を用いた科学分野において時間依存密度汎関数理論によるシミュレーション法は、大規模計算により実験を精緻に記述する数値実験室として発展を遂げている[2,3]。

参考文献

[1] T. Nakatsukasa et.al, Rev. Mod. Phys. 88, 045004 (2016).

[2] M. Lucchini et.al, Science 353, 916 (2016).

[3] A. Sommer et.al, Nature 534, 86 (2016).