

プロジェクト名(タイトル):

## SALMON を用いた金属ナノ構造の光電磁場解析

利用者氏名:

○竹内嵩(1)

理研における所属研究室名:

(1) 開拓研究本部 田中メタマテリアル研究室

### 1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

金属ナノ構造に光を照射すると、金属ナノ構造内電子の集団運動(プラズモン)が励起し、その共鳴現象を利用することでユニークな光応答が実現できる。昨今このプラズモン共鳴を利用して、太陽電池やセンシングなど様々な応用展開が広がっている。プラズモン共鳴から得られる光応答を予測するためには、Maxwell 方程式に基づく光電磁場解析が有効である。しかし、プラズモン共鳴は金属ナノ構造の形状に大きく依存するため、微細な形状変化が全く異なる光応答を発現する場面が多々ある。従って、プラズモン共鳴の持つ可能性をより掘り下げ、新奇な光応答を探索するためには、金属ナノ構造の形状の精緻な表現が不可欠であるが、これは光電磁場解析の計算コストの大幅な増加に繋がり問題となる。

このような問題を解決するため、利用者は次項に述べるオープンソース・ソフトウェア、SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience, <https://salmon-tddft.jp/>)の開発にこれまで携わってきた。SALMON は、OpenMP、MPI、GPU に対応した並列計算が可能であり、金属ナノ構造の形状を精緻にモデル化しても、それらの並列計算を組み合わせることで現実的なリソースの範囲内で計算が実行可能である。

本プロジェクトでは今年度、スーパーコンピュータ HBW を使い、SALMON への新規機能の実装や従来機能の改善を行った。また、新規機能の妥当性を検証するため、解析解が存在する問題での比較を行った。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

SALMON は、電子ダイナミクス解析用の時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算、原子・イオンダイナミクス解析用の分子動力学計算、光ダイナミクス解析用の光電磁場解析、およびそれらを組み合わせた融合物理計算機能を有する、幅広い光と物質の相互作用を対象としたソフトウェアである。本プロジェクトでは、この内の光電磁場解析機能に焦点を当て、新規機能の追加および従来機能の改善を行った。

### 3. 結果

FDTD (Finite-Difference Time-Domain)法は、光電磁場を実空間グリッドで展開し、実時間で更新するアルゴリズムである。SALMON では、FDTD 法に基づく光電磁場解析機能が実装されており、解析領域を MPI のプロセスごとに分割して並列計算を処理している。

今年度は第一に、任意の実時間間隔で一時データを出力し、後からその一時データを読み込むことで、計算を途中から再スタートさせる機能を実装した。これにより、さらなる大規模計算への適用が可能となった。

第二に、単一ないしは有限個数の金属ナノ構造に対する吸収・散乱・消光断面積の計算機能を実装した。従来の SALMON の光電磁場解析機能では、金属ナノ構造が光の波長より遥かに小さいとする双極子近似の下、吸収断面積しか計算できなかったため、これにより計算対象が拡大した。また、実装した機能の妥当性を検証するため、解析解が存在する真球型の金属ナノ構造の場合にて比較を行い、両者が一致することを確認した。

第三に、金属ナノ構造が二次元的に周期配列した系に対する吸収・反射・透過率の計算機能を実装した。従来の SALMON の光電磁場解析機能でこれらの値を求める際には、ユーザが出力データを後処理する過程が必要であったため、ソフトウェアの利便性向上へ繋がった。また、実装した機能の妥当性を検証するため、解析解が存在する金属ナノ薄膜の場合にて比較を行い、両者が一致することを確認した。

第四に、SALMON の光電磁場解析を実行する上での入力変数を見直し、一部の入力変数の値をデフォルトでは自動的に決定できるよう機能を改善した。これにより、ソフトウェアの利便性がより向上した。

### 4. まとめ

今年度は、SALMON の光電磁場解析機能において、①再スタート機能の実装、②吸収・散乱・消光断面積計算機能の実装、③吸収・反射・透過率計算機能の実装、④入力変数の改善、を行った。これらにより、ソフトウェアの計算対象の拡大、利便性の向上が行われた。

## 5. 今後の計画・展望

今後も適時、新規機能の実装や従来機能の改善を行う予定である。また、SALMON を用い、様々な状況での金属ナノ構造の光電磁場解析を行う。