

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 경우가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。

本プロジェクトは、SALMON を用いた金属ナノ構造の光電磁場解析および SALMON への新規機能実装や従来機能の改善を目的とする。今年度は SALMON の光電磁場解析機能における細かい動作確認ならびにバグ修正を行った。

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、細かな動作確認ならびにバグ修正を行った。

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。

本プロジェクトでは昨年度、SALMON の光電磁場解析機能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(A)・反射(R)・透過率(T)の計算機能(以下、ART 計算機能と表記)を実装した。

今年度は、ART 計算機能における以下 3 つの動作確認ならびにバグ修正を行った。

第一に、ART 計算機能を実行する際、観測波長点数を単一に設定すると不具合が生じることを確認し、その修正を行った。

第二に、ART 計算機能を実行する際、観測系を取り囲む環境が真空のみに限定されていることを確認した。そのため、比誘電率一定の任意の物質に対応できるよう修正を行った。

第三に、ART 計算機能を実行する際、別の機能の使用を前提とした実装となっていることを確認した。そのため、該当する別機能を使用せずとも ART 計算機能が問題なく動作するように修正した。

4. まとめ

今年度は、SALMON の光電磁場解析機能において、細かい動作確認ならびにバグ修正を行った。これにより、ソフトウェアの利便性向上が行われた。

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

2023年度 利用報告書

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。