

# スパコン プロフェッショナル

Series Supercomputer Professionals

No.10

日時：平成30年 **1月19日** (金)

**13:30~15:00**

場所：金属材料研究所 2号館 1階ラウンジ

※ お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。

## 「光励起電子ダイナミクス of 第一原理計算と 光・電子融合デバイス設計への展開」





分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域

**信定 克幸** 准教授

最先端の光科学研究の領域では、ナノ構造体における局所光励起、強い非線形効果が期待できる高強度パルス光励起など、従前の光応答では見られない多彩な光学過程が出現し始める。これらの光応答を記述するためには、光の空間的非一様性や光と電子が結合したダイナミクスを露わに考慮しなければならない。我々は、光と物質の相互作用をより厳密に扱うための理論及びその理論に基づく第一原理計算手法 SALMON (<http://salmon-tddft.jp>) を独自開発し、特にナノ構造体における近接場光励起の解明を行ってきた。さらにこの新しい光励起に起因する光高機能物質（光・電子融合デバイス）の計算科学的設計への展開も進めている。

■ 主催  計算材料学センター

■ 協賛  計算物質科学  
人材育成コンソーシアム

 ポスト「京」萌芽的課題  
「基礎科学の挑戦」

■ お問い合わせ 計算材料学センター TEL : 022-215-2411

E-mail : [ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp](mailto:ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp)