

励起状態シミュレーションは産業技術に ニーズを持つか？

出題者 産業技術総合研究所 宮本良之

講義で行った励起状態ダイナミクス分類

分子の光異性体化反応

反応中に分子軌道準位交差が起きる

固体内電子励起

Franck-Condon緩和現象(電子準位交差が起きる)

レーザー強励起現象

サブピコオーダーで原子位置が変わる(Fermi Golden ruleが使えない)

現在ではいくつかの励起状態シミュレーションパッケージがあるが、はたしてそれらが産業技術に必要な場面はあるのか？

- 合成プロセス：ほとんどは熱化学反応（まれに光化学反応）
- 光デバイスの動作解析：光センサー、太陽電池などの性能や劣化機構
- 精密加工技術：ナノスケール(リソグラフィ)、マイクロスケール(フェムト秒レーザー)
- その他

機械学習の利用によってシミュレーションを簡便化させるには、
いったい何を学習されれば良いか

参考資料：

励起状態MDのpackage(アルファベット順)

(MateriAppsホームページより)

<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp>

• exciting これらのpackageのほとんどが時間依存密度汎関数理論を採用

• FPSEID²¹

• Jaguar

密度汎関数理論 $V_{ext}(\mathbf{r})$ と $\rho(\mathbf{r})$ の間に1対1対応
ただし、電子状態は縮退のない基底状態

• ONETEP

• Octopus

• Qbox

時間依存密度汎関数理論 $V_{ext}(\mathbf{r}, t)$ と $\rho(\mathbf{r}, t)$ の間に1対1対応
ただし、電子状態($t = 0$)は縮退のない定常状態

• SALMON

• TOMBO (TOMBOMOL)

etc