

专题——计算化学虚拟实验室

并行计算在阿秒动力学领域的应用

陆瑞峰 贺海翔 韩克利

中国科学院大连化学物理研究所, 116023

摘要: 当激光场强度很强时,其作用的时间尺度可以达到亚飞秒(也就是阿秒级别),使得无论的实验上还是理论上都能够真实的观测到电子的运动。强激光场作用于原子或分子体系,产生了许多超快动力学现象,这些现象都属于非微扰理论范畴,需要对其在现有的超级计算条件下用精确的数值方法求解含时薛定谔方程。现有的方法计算比较耗时,我们开发了一套处理这类情况的量子波包程序ZH-DICP,对原有的方法进行了优化,运用OpenMP并行工具处理所有矩阵的相关操作,大大节约了CPU时间。

关键词:

pplications of the Parallel Computing for Attosecond Dynamics

Ruifeng Lu, Haixiang He, Keli Han

Dalian Institute of Chemical Physics, Dalian, 116023

Abstract: In the areas of strong laser, a substantial effort is being dedicated to producing sub-femtosecond (that is, attosecond) pulses and real-time observation of the motion of electrons for experimentalists and theorists alike. When atoms or molecules exposed in a strong laser feld, a lot of ultrafast dynamics phenomena can be generated. From a theoretical point of view, investigating these nonlinear phenomena relies on exact numerical solutions of the time-dependent Schrödinger equation (TDSE) on recently available super-computers. Actually, numerous theoretical researches, not only for atoms but also for molecules, have been carried out up to date, but CPU time is long. We developed a parallel quantum electron and nuclei wave packet computer code, LZH-DICP, to study laser-atom/molecule interaction in the nonperturbative regime with attosecond resolution and tested the efficiency of the code.

Keywords:

收稿日期 2008-11-14 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者:

作者简介:

作者Email:

参考文献:

本刊中的类似文章

文章评论

扩展功能

本文信息

- Supporting info
- PDF(1144KB)
- [HTML全文]
- 参考文献[PDF]
- 参考文献

服务与反馈

- 把本文推荐给朋友
- 加入我的书架
- 加入引用管理器
- 引用本文
- Email Alert
- 文章反馈
- 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

本文作者相关文章

- 陆瑞峰
- 贺海翔
- 韩克利

PubMed

- Article by
- Article by
- Article by

反 馈 人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反			

反馈
标题

验证码

3984