19a-C2-9

強レーザー場中の多電子ダイナミクス: 原子のための実装

Multielectron dynamics in intense laser fields: Implementation for atoms

東大院工 [1]，○ 佐藤 健 [1]，石川 顕一 [1]

University of Tokyo[1], ○Takeshi Sato[1], Kenichi L. Ishikawa[1]

E-mail: sato@atto.t.u-tokyo.ac.jp

超短パルス・高強度光源を用いて電子の運動を直接研究するアト秒科学が急速に発展している [1]。実験の精密化に伴い、有効一電子描像を超える多電子理論への期待が高まっているが、強レーザー場中の多電子系の時間依存 Schrödinger 方程式（TDSE）を直接解くのは極めて困難である。TDSE と有効一電子モデルの間のギャップを埋める、近似的な多電子理論が必要である。最も簡単な多電子理論：時間依存 Hartree-Fock（TDHF）法はトンネル電離過程を全く記述できない [2]。時間依存密度汎関数理論（TDDFT）にも同質の困難がある。電離過程を正しく記述するには、多配置自己無撞着場（MCSCF）波動関数が必要である：

$$\Psi_{\mathrm{MCSCF}}(1,2,\cdots,N,t) = \sum_{\mathbf{I}} \Phi_{\mathbf{I}}(t) C_{\mathbf{I}}(t), \quad \Phi_{\mathbf{I}}(t) = \det\Big[\phi_i(1,t)\phi_j(2,t)\cdots\phi_k(N,t)\Big], \tag{1}$$

ここで $\Phi_{\mathbf{I}}$ は軌道関数 $\{\phi_i\}$ から作られる行列式波動関数で、展開係数 $\{C_{\mathbf{I}}\}$ と軌道関数の形状の両方が変分的自由度である。私達は MCSCF 波動関数（1）に基づく新しい多電子理論として TD-CASSCF 法 [3] や TD-ORMAS 法 [4] を開発してきた。

現在まで、計算コード開発は全て一次元モデルハミルトニアンに対して行ってきた。しかし、実験を再現したり、説明したり、新しい現象を予言したりするためには、三次元の第一原理ハミルトニアンに対する実装が必要である。これを実時間・実空間で実現するためには、コア領域の波動関数を精度よく記述するために十分きめ細かく、しかも電離電子波束を十分遠方までサポートする広い空間領域でグリッド離散化する必要がある。これは一般的な多原子分子では高度に挑戦的な課題であり、本研究の次のステップとする。一方、原子や二原子分子では現在の並列計算機環境のもとで達成可能な段階にあり、多くの興味ある実験も原子や直線型分子に対して行われている。本研究の目的は、TD-CASSCF 法をはじめとする多電子理論の原子のための実装である。

断熱近似下の原子の量子力学的記述に適した座標は極座標である。よく用いられるのは球面調和関数 $\{Y_{lm}\}$ による展開：$\chi_{klm}(\boldsymbol{r}) = \zeta_k(r)/r \cdot Y_{lm}(\theta,\phi)$ で、動径関数 $\zeta_k(r)$ は有限要素-離散値表現（FEDVR）基底で展開するのが最も効率的である。しかし本研究では動径方向、角度方向ともに DVR で離散化した直積基底を試みる。すなわち

$$\chi_{k\gamma}(\boldsymbol{r}) = \frac{\zeta_k(r)}{r} \cdot \Gamma_\gamma(\Omega), \quad \Gamma_\gamma(\Omega) = \sqrt{w_\gamma} \sum_{lm} Y^*_{lm}(\Omega_\gamma) Y_{lm}(\Omega). \tag{2}$$

球面上の求積には二次元（極方向は拡張 Legendre DVR、方位角方向は等間隔 DVR）または一次元の Lebedev DVR を用いる。直積 DVR 基底の最大の長所は位置演算子（の関数）が完全に対角的になることである。とくに、基底関数間の二電子反撥積分が 2 インデックスの量に帰着し: $g_{k_1\gamma_1 k_2\gamma_2, k_3\gamma_3 k_4\gamma_4} = \delta_{k_1k_2}\delta_{k_3k_4}\delta_{\gamma_1\gamma_2}\delta_{\gamma_3\gamma_4}\bar{g}_{k_1\gamma_1,k_3\gamma_3}$、$\bar{g}_{k_1\gamma_1,k_3\gamma_3}$ は Poisson 方程式を解いて求めることができる。この特徴を活かして高効率な分散メモリ型並列計算コードを作成する。発表では実装の進捗状況と応用計算例を報告する。

[1] F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys., 81, 163 (2009). [2] T. Sato and K. L. Ishikawa, J. Phys. B, submitted. [3] T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A, 88, 023402 (2013). [4] T. Sato and K. L. Ishikawa, in preparation.

© 2014 年　応用物理学会