# 非対称な系への Multi-resolution MCTDHF の適用

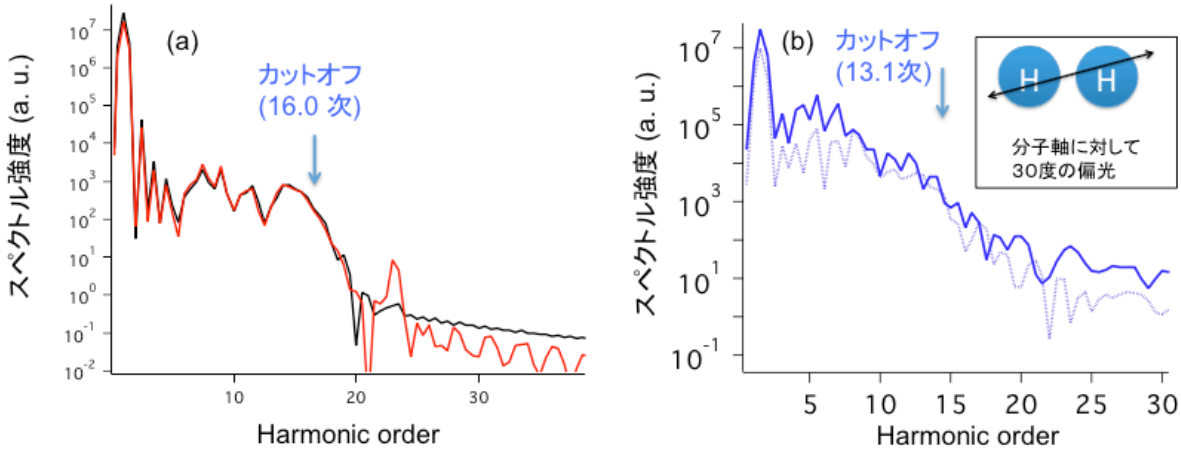
## Application of Multi-resolution MCTDHF to non-symmetric systems

東大院工 ○澤田 亮人, 佐藤 健, 石川 顕一
Univ. Tokyo ○Ryohto Sawada, Takeshi Sato, Kenichi L. Ishikawa
E-mail: sawada49@atto.t.u-tokyo.ac.jp

高強度レーザーパルス下での電子・原子ダイナミクスの研究は、電子・原子のアト秒、オングストローム精度の測定・制御への応用が期待されている。特に近年、高強度場下での分子内の電子のダイナミクスが理論・実験の双方から注目を浴びている。しかし、従来の計算手法の多くは球面調和関数展開など系の対称性に依存した手法であり、原子の計算は高速に行える一方で、分子計算への適用が難しかった。

そこで、本研究では直交座標をベースとした非等間隔グリッド上に関数を展開することで、系の対称性に依存しない計算を実現した。更に、この手法を Multi Configuration Time-dependent Hatree-Fock (MCTDHF)に適用することで、非対称・多電子な系での計算を可能とした。

図(a)はヘリウム原子の高次高調波スペクトルにおける、本研究の手法と球面調和関数展開の計算結果の比較である。スペクトル形状はほぼ一致しており、本研究の手法で高次高調波が十分な精度で行われていることが確認できる。図(b)は分子軸に対して斜めの偏光の光を入射した場合の水素分子の高次高調波である。講演では Multi-resolution 計算の実装方法の詳細と、より大規模な系への適用について解説する予定である。




図：本研究の手法によって計算された原子・分子の高次高調波。入射光は 400nm、$8\times10^{14}$ W/cm$^2$ 。(a) ヘリウム原子の高次高調波スペクトル。 (b) 分子軸に対して斜めの偏光の光を入射した場合の水素分子の高次高調波スペクトル。

© 2015年 応用物理学会