

α 水晶中での高次高調波発生過程の第一原理シミュレーション

First-principle calculation for the High-Harmonic Generations in α -Quartz

(国) 量研機構 乙部 智仁

QST, Tomohito Otohe

E-mail: otohe.tomohito@qst.go.jp

超短パルスレーザーと物質の相互作用による高次高調波発生 (HHG) はアト秒パルス光生成や分子の超高速現象観測を可能とするなど重要な非線形現象である。一般的に HHG は原子・分子とレーザーにより電離した電子の再衝突過程から発生する。一方、近年誘電体とレーザーの相互作用により光学ギャップを超える HHG の発生が多く報告されている。しかし、その HHG 発生過程やプラトー領域のカットオフを決める物理には不明な点が多い。

本研究では超短パルスレーザーと α 水晶の相互作用を時間依存密度汎関数法の基礎方程式である時間依存 Kohn-Sham 方程式を実時間法で解くことにより [1,2]、HHG 生成過程のシミュレーションを行った。計算結果の解析から、 α 水晶からの HHG のプラトー領域の生成とカットオフを決めるのは電子-空孔の相互作用 (再衝突過程) であり、カットオフは荷電帯のバンド幅で決まることがわかった。さらに、カットオフを形成する最も深く束縛された荷電帯空孔と、伝導帯電子の相互作用から発生する HHG はレーザー電場が 0 になる時刻付近で位相が揃っており、200 アト秒程度のパルス列となっていることが明らかとなった。これは α 水晶では空孔の有効質量が非常に重く、荷電帯が分裂しているために明確な結果が得られたと思われる。

講演では計算結果とその解析の詳細について詳しく発表する。

- [1] T. Otohe, M. Yamagiwa, J. -I. Iwata, K. Yabana, T. Nakatsukasa, and G. F. Bertsch, PRB 77, 165104 (2008).
- [2] T. Otohe, J. Appl. Phys. 111, 093112 (2012).