

外部複素スケーリングを用いた 強レーザー場における多電子系第一原理計算の高速化 Speed up of first-principles calculation for multi-electron systems in intense laser fields by using exterior complex scaling

○織茂 悠貴、佐藤 健、石川 顕一 (東大院工)

°Yuki Orimo, Takeshi Sato, Kenichi L. Ishikawa (Univ. Tokyo)

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

超高速・高強度レーザーの実現に伴い、レーザー場によって誘起されるアト秒スケールの電子ダイナミクス(高次高調波発生や非逐次二重電離等)が注目されている。現象の理論的理解において、複雑な電子ダイナミクスの数値計算による解析は重要な役割を担っている。我々は多電子系の第一原理計算を現実的な計算時間で行うため TD-CASSCF 法などの多電子波動関数理論を開発してきた[1, 2, 3]。これらの手法は電子数に依存する計算コストを大幅に削減することができ、より大規模な系での第一原理計算を可能にした。

しかし強レーザー場下では、イオン化に伴う電離電子の反射を防ぐための大きな空間領域が計算コスト増加を引き起こす。この問題に関して、近年、吸収境界として外部複素スケーリング(Exterior complex scaling, ECS)を用いることで、一電子系においては反射を計算機精度以下に抑えられることが報告された[4]。我々はこれまで、ECS の適用範囲を多電子系に拡張し、実際に MCTDHF 法[5]に実装することで、精度をほとんど落とすことなく、必要な空間領域を大幅に狭め、多電子系第一原理計算の計算時間を短縮することに成功してきた。本研究では、これをさらに TD-CASSCF 法[1]に実装することを目的とした。

Fig. 1 は波長 800 nm、強度 $3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ のレーザー場下の Be 原子を TD-CASSCF 法でシミュレートすることで得た、ある時刻における一電子動径分布関数である。我々が従来使用していた吸収境界(マスク関数法)では、吸収領域より内側で動径分布関数は大きく歪んでしまう。しかし ECS による結果は、上記のマスク関数法と同様の空間領域でも、十分に広い空間領域を用いて得られる結果と非常に良く一致していることが分かる。講演では ECS の多電子系への適用方法の詳細を述べ、その精度と吸収された波動関数の復元方法を議論する予定である。

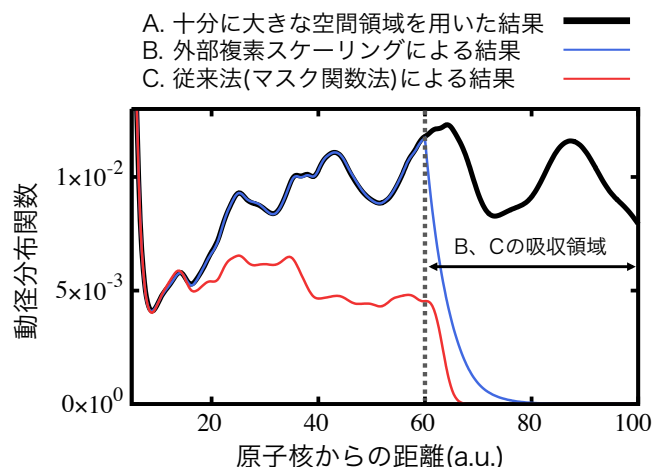


Fig. 1 動径分布関数の比較

- [1] T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **88**, 023402 (2013).
- [2] T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **91**, 023417 (2015).
- [3] K. L. Ishikawa and T. Sato, IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron. **21**(5), 8700916 (2015).
- [4] A. Scrinzi, Phys. Rev. A **81**, 053845 (2010).
- [5] T. Kato and H. Kono, Chem. Phys. Lett. **392**, 533 (2004).