

高強度レーザー場中の多電子ダイナミクス：時間依存波動関数理論の原子・分子への応用

Multielectron dynamics in intense laser fields: Applications of time-dependent wave function theories to atoms and molecules

東大院工¹, ○佐藤 健¹, 石川 顕一¹

University of Tokyo¹, ○Takeshi Sato¹, Kenichi L. Ishikawa¹

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

私達は高強度レーザー場中の多電子ダイナミクスを記述するため、TD-CASSCF 法 [1] や TD-ORMAS 法 [2] と呼ぶ新しい時間依存波動関数理論を開発してきた。これらの手法を原子 [3, 4]、分子 [5] に適用し、希ガス原子や水素分子、水分子からの高次高調波発生などの精確な計算を世界に先駆けて実現した (図 1 参照)。本発表では、第一原理多電子ダイナミクス理論の世界における最先端 [3] と私達のグループの最近の成果を概観し、原子・分子への応用計算について報告する。

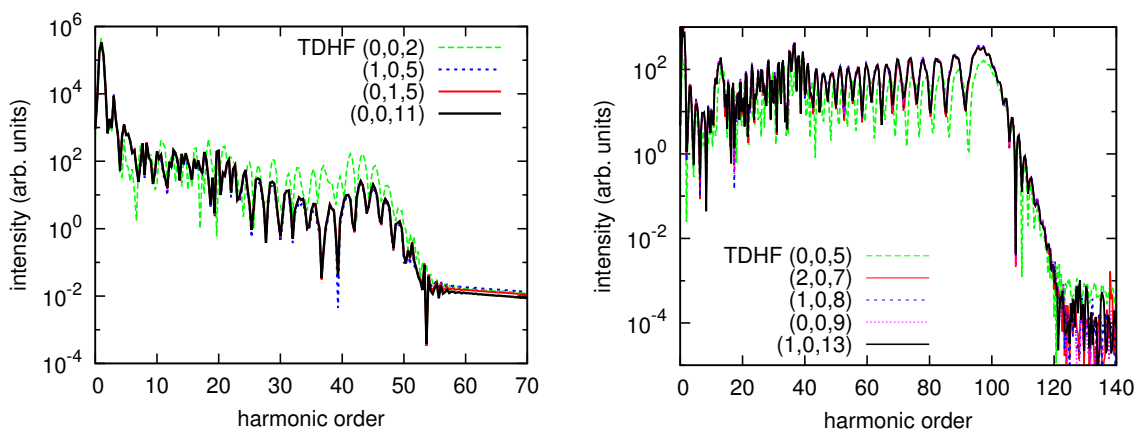


図 1: (左) 波長 800 nm、強度 3×10^{14} W/cm² の近赤外パルス照射時の Be 原子からの高次高調波スペクトル。(右) 波長 800 nm、強度 8×10^{14} W/cm² の近赤外パルス照射時の Ne 原子からの高次高調波スペクトル。括弧内の数字 (n_{fc} , n_{dc} , n_{act}) はそれぞれ凍結コア軌道 (二重占有され初期波動関数に固定)、動的コア軌道 (二重占有され外場に応答して時間発展)、アクティブ軌道 (電子相関を取り入れて時間発展) の数を示している。

参考文献

- [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**, 8700916 (2015).
- [4] T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A, submitted; arXiv:1605.00703.
- [5] R. Sawada and T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A, **93**, 023434 (2016).