

非対称な系への Multi-resolution MCTDHF の適用 2

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

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

近年、高強度レーザーパルスによる分子の超高精度測定が注目を浴びている。現象の根源である電子のダイナミクスを理解し新規実験手法を提唱する上で、数値計算によって実験的に得られる物理量と電子ダイナミクスを結びつけるのは有効な手段である。

分子は原子に比べ対称性が低いため、核近傍での空間分解能と、イオン化を扱える計算領域の広さの両立が難しい。前回の講演では、直交座標ベースの Multi-resolution グリッドを Multi Configuration Time-dependent Hatree-Fock 法(MCTDHF。多電子系の高速・高精度な第一原理計算手法)に適用することで水分子の高次高調波を計算できることを報告した。本研究では Multi resolution MCTDHF を各種分子ダイナミクスへ適用しメカニズムを解明することを目指す。

下図は現在計算中である、アト秒パルス照射後の LiH 分子のホール密度（電子密度と定常状態の電子密度の差分）の時間変化である。パルス照射によって Li 側に生じたホールが約 0.4 fs かけて H 側に移動(hole migration)しているのが解る。本講演ではこれらの現象のメカニズムと、より大規模な系を扱うための計算の高速化手法について議論する予定である。

