

外部複素スケーリングを用いたコンパクトな 強レーザー場第一原理計算

Compact first-principles calculation in intense laser fields by exterior complex scaling

○織茂 悠貴、佐藤 健、澤田 亮人、石川 顕一 (東大院工)

○Yuki Orimo, Takeshi Sato, Ryohto Sawada, Kenichi L. Ishikawa (Univ. Tokyo)

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

高強度レーザーパルス的发展に伴い、電子のアト秒スケールでのダイナミクスや高次高調波発生などの興味深い現象に関心が集まっている。これまでに高速な第一原理計算を実現するために、私たちは電子の軌道関数の増加に伴う計算コストの増加を大幅に削減する多電子波動関数理論[1, 2, 3]の開発をしてきた。しかし強レーザー場における第一原理計算では、電子のイオン化を正確に記述するための広い空間領域も計算コスト増加の要因の一つになっている。この問題に対して、遠方のイオン化した電子を吸収する吸収境界を用いることで、必要な空間領域を狭めているが、マスク関数法や複素吸収ポテンシャル法といった吸収境界では、完璧な吸収は難しいのが現状である。そこで、吸収境界として優れていると報告されている外部複素スケーリング(Exterior complex scaling, ECS)[4, 5]をTD-CASSCF 法[1]へ実装することを本研究の最終目標とする。その第一段階として一電子系への ECS の実装を行い、計算時間を大幅に短縮することに成功した。

Fig. 1、Fig. 2 は、水素原子に波長 760 nm、強度 2×10^{14} W/cm²、5 サイクルのレーザーを入射した際のイオン化率と高次高調波スペクトルである。収束結果は十分に広い空間領域を用いて得た結果である。マスク関数法、ECS はともに同じ空間領域、吸収幅を用いて吸収を行っているが、ECS を用いた計算結果のみが収束結果を非常に良く再現していることが確認出来る。講演では、ECS の多電子系への適用や実装の詳細、応用計算例などを報告する予定である。

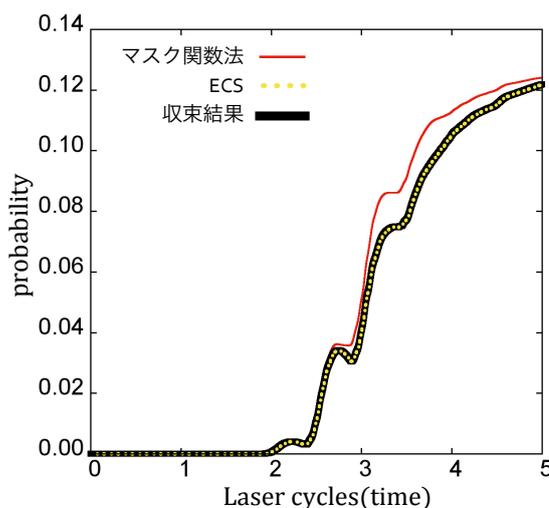


Fig. 1 イオン化率の計算結果の比較

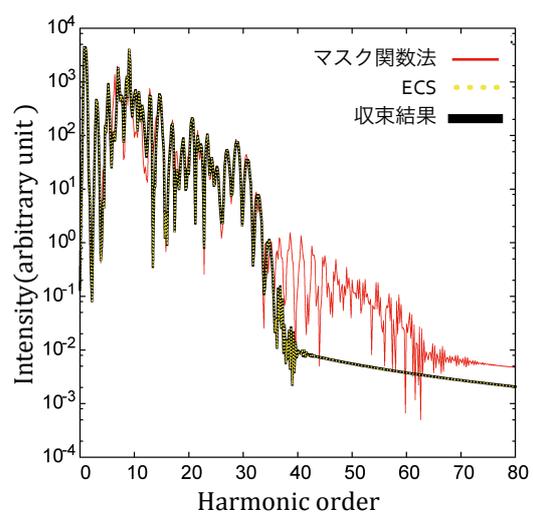


Fig. 2 高次高調波スペクトルの計算結果の比較

[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] B. Simon, Phys. Lett. A **71**, 211 (1979). [5] L. Tao, et al, Phys. Rev. A **80**, 063419 (2009).