

アト秒パルスによるネオン原子のイオン化の第一原理シミュレーション

First principle simulation of the ionization of Ne induced by the attosecond pulse

○岩津 広大¹, 佐藤 健², 石川 顕一² (1. 東大工、2. 東大院工)

○Kodai Iwatsu, Takeshi Sato, Kenichi L. Ishikawa (Univ. Tokyo)

E-mail: iwae93@yahoo.co.jp, sato@atto.t.u-tokyo.ac.jp, ishiken@atto.t.u-tokyo.ac.jp

光イオン化は最も基本的な光と物質の相互作用のひとつである。近年の超短パルス光源の進歩によって、光イオン化をアト秒 (10^{-18} 秒) スケールの時間分解能で直接観測できるようになってきた【1-2】。とくに Schultze ら【3】は極端紫外 X 線 (XUV) 領域のアト秒パルスと近赤外 (NIR) パルスを用いたポンプ・プローブ実験 (アト秒ストリーキング実験) によって Ne 原子の 2s 軌道および 2p 軌道から電子が放出されるタイミングの差を測定し、2s 電子がおおよそ 20 アト秒早く放出されると報告した。しかしこの結果はこれまでの理論予測【4-6】より 2 倍以上大きく (例えば Feist らは時間差 10 アト秒を報告【6】)、実験と理論の不一致の原因は未だ明らかにされていない。本研究の最終的な目的は、高精度な第一原理シミュレーションによって、この重要な未解決問題に解答を与えることである。

従来の理論計算は時間に依存しない方法と時間に依存する手法に大別できる。前者は電子相関を精度よく取り込むことができるが、NIR 電場 (ストリーク電場) の効果を取り入れられないために実験に直結する結果を得るのが難しい。一方後者では電場の効果を取り入れられるが、多電子系の電子相関を考慮したシミュレーションは極めて困難であった。

本研究では、我々のグループで開発してきた時間依存・多電子計算法【7-9】によってアト秒ストリーキング実験を直接シミュレートし、Ne 原子の 2s および 2p 電子のイオン化時間差を求めることを試みる。その第一段階として、最も簡単な多電子理論である時間依存 Hartree-Fock (TDHF) 法によるシミュレーションを行った。予備的な結果を図 1 に示す。講演では TDHF 法に基づくスペクトログラム計算法、および FROG-CRAB 法【10】による電離波束再構築アルゴリズムの概要を述べ、計算結果を議論する予定である。

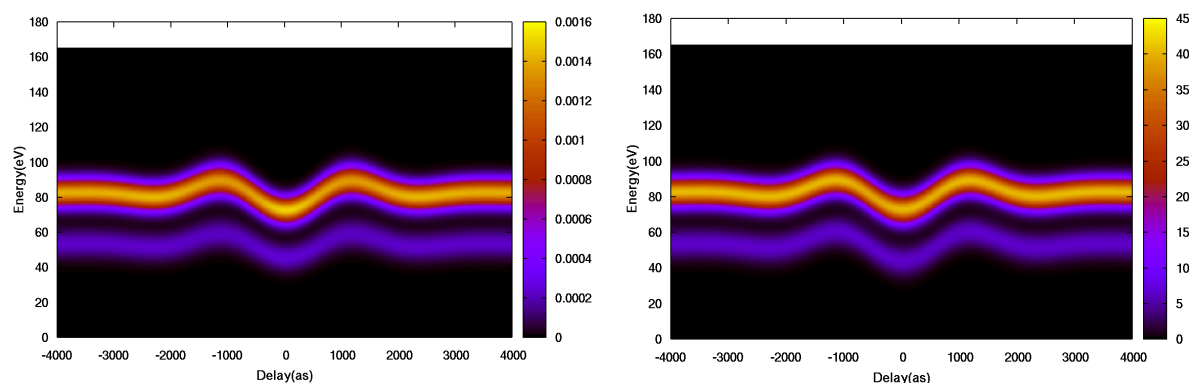


図 1 左は TDHF 法によって計算されたスペクトログラム、右は FROG-CRAB 法によって再構築されたスペクトログラムである。

- 【1】P. B. Corkun and F. Krausz, Nat. Phys. 3, 381 (2007). 【2】F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. 81, 163 (2009). 【3】M. Schultze et al., Science 328, 1658 (2010). 【4】L. R. Moore et al., Phys. Rev. A 84, 061404 (2011). 【5】A. S. Kheifets, Phys. Rev. A 87, 063404 (2012). 【6】J. Feist et al., Phys. Rev. A 89, 033417 (2014). 【7】T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A 88, 023402 (2013). 【8】T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A 91, 023417 (2015). 【9】K. L. Ishikawa and T. Sato, IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron. 21, 8700916 (2015). 【10】Y. Mairesse and F. Quéré, Phys. Rev. A 71, 011401 (2005).