

# ゲージに依存しない時間依存一電子励起配置間相互作用 (TDCIS) 法の 三次元原子への実装

Implementation of gauge-invariant time-dependent configuration interaction singles  
(TDCIS) method to three-dimensional atom

東大院工<sup>1</sup>, °寺村 拓磨<sup>1</sup>, 佐藤 健<sup>1</sup>, 石川 顕一<sup>1</sup>

UTokyo<sup>1</sup>, °Takuma Teramura<sup>1</sup>, Takeshi Sato<sup>1</sup>, and Kenichi L. Ishikawa<sup>1</sup>

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

レーザー技術の進歩により発展が進むアト秒科学において、電荷マイグレーションのような分子中で起きる電子ダイナミクスを記述できる手法の重要性が増している。我々は複雑な電子ダイナミクスを記述可能な時間依存自己無撞着場(TD-MSCF)法に基づく計算手法を開発してきた[1]。一方で大規模な系の計算に有望な方法として時間依存一電子励起配置間相互作用(TDCIS)法がある。TDCIS 法では全電子波動関数を時間に依存しない Slater 行列式の線形結合で表す。

$$\Psi(t) = \Phi_0 C_0(t) + \sum_i^{\text{occ}} \sum_a^{\text{vir}} \Phi_i^a C_i^a(t)$$

上式において $\Phi_0$ は Hartree-Fock(HF)近似における基底状態、 $\Phi_i^a$ は占有軌道 $\phi_i$ から非占有軌道 $\phi_a$ への一電子励起配置である。系の時間発展は展開係数 $C_0$ ,  $\{C_i^a\}$ の時間発展によって記述されるが、チャンネル軌道 $\chi_i(t) \equiv \sum_a^{\text{vir}} \phi_a C_i^a(t)$ を導入し、 $\{C_i^a\}$ の代わりに $\{\chi_i\}$ を時間発展させることで非占有軌道の計算が不要となる[2]。さらに、長さゲージにおける運動方程式をユニタリ変換 $\hat{U}(t) \equiv \exp(-i\mathbf{A}(t) \cdot \sum_i \mathbf{r}_i)$ によって変換させた運動方程式を速さゲージとして用いることで、ゲージ不変性を担保することができる[3]。 $\mathbf{A}(t)$ はベクトルポテンシャル、 $\mathbf{r}_i$ は電子の座標である。

本研究では、ゲージ不変な TDCIS 法を初めて三次元原子へ実装した。図は He における高次高調波スペクトルである。本研究の速さゲージでは長さゲージと同様の計算結果が得られることがわかる。講演では、理論の概要と計算結果の詳細について報告する。

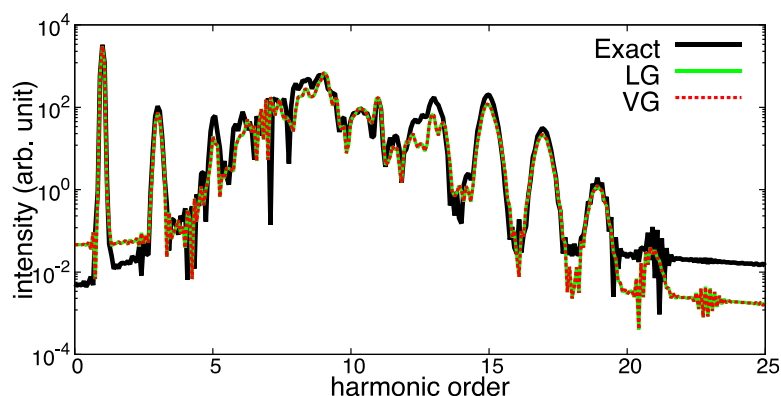


図 He に波長 400 nm、強度  $4.0 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> のパルス照射時の高次高調波スペクトル。

黒線は時間依存 Schrödinger 方程式による厳密解である。

[1] T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **91**, 023417 (2015).

[2] N. Rohringer, A. Gordon, and R. Santra, Phys. Rev. A **74**, 043420 (2006).

[3] T. Sato, T. Teramura, and K. L. Ishikawa, Appl. Sci. **8**, 433 (2018).