

アト秒イオン化におけるコヒーレントなホールダイナミクスの解析

Ab initio analysis of coherent hole dynamics in attosecond photoionization

東大院工¹, [○](M1)寺村 拓磨¹, 織茂 悠貴¹, 佐藤 健¹, 石川 顕一¹

UTokyo¹, [○]Takuma Teramura¹, Yuki Orimo¹, Takeshi Sato¹, and Kenichi L. Ishikawa¹

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

レーザー技術の進歩によってアト秒スケールの時間幅を持つ超短パルス生成が可能となった。広いエネルギースペクトルを持つアト秒パルスは複数のイオン状態のコヒーレントな重ね合わせ(電子波束、ホール波束)を作りだし、電荷マイグレーションを引き起こす。アト秒～数フェムト秒スケールの高速電子ダイナミクスであるこの現象は、分子構造の変化や化学反応を駆動すると考えられている。我々はこのような現象に対して波動関数ベースの第一原理シミュレーションを行う研究を進めている。そのためには、精確な波動関数理論に加え、シミュレーションで得られる全波動関数からイオン状態のポピュレーションやコヒーレンスを解析する方法を開発する必要がある。

軌道関数が時間発展しない時間依存一電子励起配置間相互作用(TDCIS)法では、縮約イオン密度行列(RIDM)が電子配置から直接定義でき、ホール状態間のコヒーレンスが議論されている[1]。しかし、これは、軌道関数が時間発展する場合には使えない。そこで、本研究では、実空間上での電子の位置に基づいてイオンを定義し、電離電子に対する密度行列の縮約を実空間上の積分に置き換えた RIDM を提案する。これによって軌道関数が時間発展する波動関数理論を用いてホール状態の解析を行うことを可能にした。図はアト秒パルスを Xe に照射するシミュレーションを時間依存ハートリーフォック法で行い、4d₀ 軌道と 5s 軌道のホール状態のポピュレーションとコヒーレンスを計算したものである。講演では RIDM の計算及び解析結果の詳細について報告する。

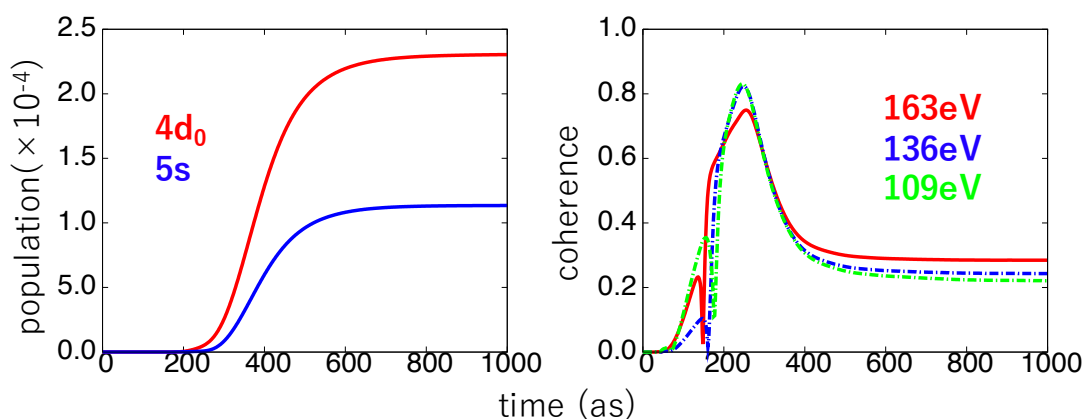


Fig. 1 (左)強度 25GV/m、エネルギー136eV、幅(FWHM)20as のパルスを Xe に照射した時の 5s 軌道と 4d₀ 軌道のホール状態のポピュレーションの時間変化 (右)強度 25GV/m、幅 20as のパルスを Xe に照射した時の 5s 軌道と 4d₀ 軌道のホール状態間のコヒーレンスの時間変化

[1] S. Pabst, et al, Phys. Rev. Lett, **106**, 053003 (2011)