

## 時間依存一電子励起配置間相互作用 (TDCIS) 法のゲージ依存性について On the gauge dependence of time-dependent configuration interaction singles (TDCIS) method

東大院工<sup>1</sup>, <sup>○</sup>佐藤 健<sup>1</sup>, 寺村 拓磨<sup>1</sup>, 織茂 悠貴<sup>1</sup>, 石川 顕一<sup>1</sup>

The University of Tokyo<sup>1</sup>, <sup>○</sup>Takeshi Sato<sup>1</sup>, Takuma Teramura<sup>1</sup>, Yuki Orimo<sup>1</sup>, and Kenichi L. Ishikawa<sup>1</sup>

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

私達は高強度レーザー場中の多電子ダイナミクスを記述するため、時間依存自己無撞着場法 (TD-MCSCF) に基づく計算手法を開発してきた [1,2]。TD-MCSCF 法はゲージ不変な理論であり (長さゲージと速度ゲージでの計算結果が一致する。) 原子・分子の任意の初期状態からの複雑な励起・電離過程を記述し得る強力な計算手法だが、大規模な系をより簡便に計算できる手法として、時間依存一電子励起配置間相互作用 (TDCIS) 法がある [3]。

TDCIS 法では全電子波動関数  $\Psi(t)$  を時間に依存しないスレーター行列式で展開し、

$$\Psi(t) = C_0(t)\Phi_0 + \sum_i^{occ} \sum_a^{vir} C_i^a(t)\Phi_i^a, \quad (1)$$

展開係数  $C_0(t), \{C_i^a(t)\}$  の時間発展によって電子ダイナミクスを記述する。ここで  $\Phi_0$  は占有軌道  $\{\psi_j\}$  から構成される基底状態のハートリー・フォック (HF) 波動関数、 $\Phi_i^a$  は占有軌道  $\psi_i$  から非占有軌道  $\psi_a$  への一電子励起配置関数である。TDCIS 法の適用は基底状態からの一電子励起・電離過程に限られるが、理論の簡潔さに由来する低い計算コストや結果解析の容易さなどの際立った利点がある。さらに、量  $\chi_i(t) = \sum_a^{vir} \psi_a C_i^a(t)$  を導入することにより展開係数  $\{C_i^a\}$  を直接用いる理論と等価な軌道理論を、非占有軌道  $\{\psi_a\}$  を参照せずに構築できる [3]。しかし、理論がゲージ不変でないという問題点がある。とくに、高強度場現象の記述で有利な速度ゲージで適切なシミュレーションを行えないのは大きな欠点である。

そこで本研究では、時間に依存しないスレーター行列式、つまり固定された軌道  $\{\psi_j\}$  を用いた長さゲージにおける運動方程式を出発点とし、ユニタリ変換  $\hat{U}(t) = e^{-iA(t)\cdot\sum_i r_i}$  によってこれと結ばれる運動方程式を速度ゲージにおけるシミュレーションで採用することを提案する。ここで  $A(t)$  はレーザー場によるベクトルポテンシャル、 $r_i$  は電子座標である。発表では理論の概要を説明し、長さゲージ、固定した軌道を用いた速度ゲージ、および本研究における速度ゲージの各運動方程式を採用した数値計算結果の比較について、また高次高調波発生の計算などで重要な役割を果たす双極子加速度の適切な計算方法について議論する。

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