

曲線座標による時間依存ハートリー・フォック法の数値実装

Numerical implementation of time-dependent Hartree-Fock method

on a curvilinear coordinate

東大院工¹, ○磯野悠太郎¹, チョガディ アミン¹, 篠原 康¹, 佐藤 健¹, 石川 顕一¹

School of Engineering, The Univ. of Tokyo¹, Yutaro Isono¹, Amin Choghadi,

Yasushi Shinohara¹, Takeshi Sato¹, and Kenichi L. Ishikawa¹

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

アト秒パルスの発生に利用される高次高調波発生は、高強度場現象の一つとして盛んに研究されている[1]。このような高強度場現象における電子運動は時間依存シュレーディンガー方程式により記述されるが、その計算コストは電子数の増加により指数関数的に増加する。また、イオン化した電子のための広い計算領域と、ポテンシャルを正しく計算するための原子核近傍での高解像度の両立が必須である。これを現実的な計算時間で正確に計算するために、本研究室では、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法[2]、計算領域と高解像度を両立する多重解像度直交座標グリッド[3]、優秀な吸収境界条件である外部複素スケーリング[4]などの計算手法を開発してきた。本研究では、時間依存ハートリー・フォック(TDHF)法によって得られる軌道関数の運動方程式を曲線座標により数値計算するプログラムを開発した。吸収境界条件には外部複素スケーリング法を用いて、TDHF法によるC₂H₂分子の高次高調波の計算に初めて成功した(図)。また、HOMO軌道の時間変化を分析することで、分子軸に垂直な偏光、並行な偏光を照射した場合を比較した際、高調波スペクトルが異なることの説明に成功した。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。

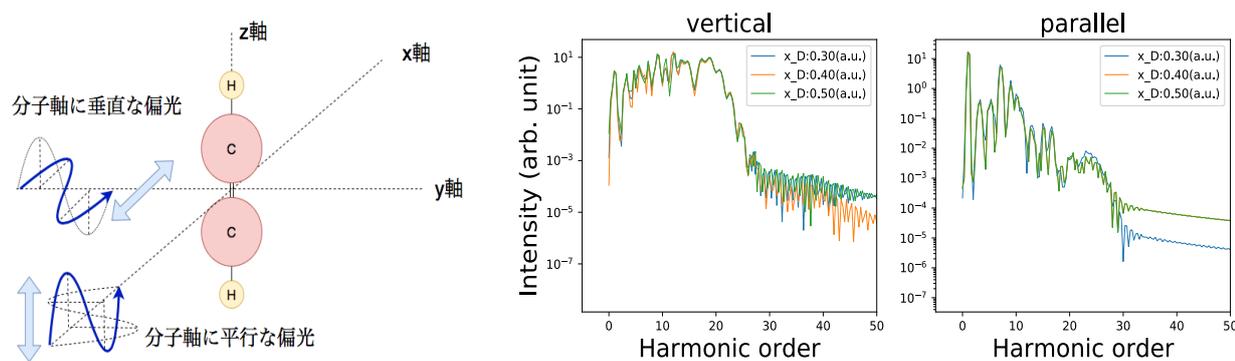


図. C₂H₂分子と照射する偏光の位置関係(左)。強度 $1.0 \times 10^{14} \text{W/cm}^2$ のパルス照射時の高調波スペクトル(x_D:グリッドの刻み幅)。分子軸に対して垂直な偏光を照射した場合(中央)分子軸に対して平行な偏光を照射した場合(右)

[1] H. W. van der Hart, *Science*, **328**, 1645 (2010).

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

[3] R. Sawada, T. Sato, and K. L. Ishikawa, *Phys. Rev. A*, **93**, 023434 (2016)

[4] Y. Orimo, T. Sato, A. Scrinzi, and Kenichi L. Ishikawa, *Phys. Rev. A*, **97**, 023423 (2018)