

非断熱分子ダイナミクスのための時間依存結合クラスター法の開発

Time-dependent coupled-cluster method for nonadiabatic molecular dynamics

東大院工 ○佐藤 健, 石川 顕一

Univ. Tokyo, ○Takeshi Sato and Kenichi L. Ishikawa

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

超短パルス高強度レーザーを用いて物質中の電子を電子固有のアト秒スケールで直接観測・制御するアト秒科学が進展し、光物質科学の最先端かつ最も基礎的な研究分野として注目を集めている。私達はこれまで、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に、時間依存多配置自己無撞着場法 (TD-MCSCF) [1,2] や時間依存最適化結合クラスター理論 (TD-OCC) [3] を開発し、原子・分子に応用してきた [4-7]。これにより、与えられた分子構造で核を固定した場合の電子ダイナミクスの高精度計算が、生体の主要な構成ユニットであるアミノ酸や、同程度の大きさの有機分子について可能になりつつある。一方、電子運動と原子核運動の時間スケールが重なる ~ 100 フェムト秒領域では、電子と原子核を量子的に扱う非断熱シミュレーションが必須である。本発表では、分子中の電子と原子核をともに量子的に扱う非断熱分子ダイナミクスに向けた、多成分 TD-MCSCF 法 [8] および多成分 TD-OCC 法の開発と数値実装について進捗を報告する。

[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] T. Sato, H. Pathak, and K. L. Ishikawa, J. Chem. Phys. **148**, 051101 (2018).

[4] T. Sato, K. L. Ishikawa, I. Břesinová, F. Lackner, and J. Burgdörfer, Phys. Rev. A **94**, 023405 (2016).

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

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

[7] Y. Orimo, T. Sato, and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **100**, 013419 (2019).

[8] R. Anzaki, T. Sato, and K. L. Ishikawa, Phys. Chem. Chem. Phys. **19**, 22008 (2017).