

時間依存一電子配置間相互作用法の固体への適用

Application of the time-dependent configuration interaction singles method to solids

東大院工¹, [○]寺村 拓磨¹, 篠原 康¹, 佐藤 健¹, 石川 顕一¹

UTokyo¹, [○]Takuma Teramura¹, Yasushi Shinohara¹, Takeshi Sato¹, and Kenichi L. Ishikawa¹

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

非摂動領域の高強度レーザー光が起こす電子ダイナミクスの研究は、原子・分子のみならず半導体などの固体にも広がっている。我々はTD-MCSCF法(時間依存多配置自己無撞着場法)[1]などの多配置波動関数理論の開発を行い、原子・分子における電子相関の記述を実現してきた。固体中の電子ダイナミクスに対しても平均場近似[2]を超えた電子相関の記述を実現することが求められている。

我々が開発してきた多配置理論のなかで固体への適用に有望なものの一つがTDCIS法(時間依存一電子励起配置間相互作用法)[3, 4]である。TDCIS法は一電子励起・イオン化の範囲で現実的な計算コストで計算することができ、結果の解析が容易である。TDCIS法では電子系の波動関数をHF(Hartree-Fock)基底状態 Φ_0 と一電子励起配置 Φ_i^a の線形結合によって

$$\Psi(t) = \Phi_0 C_0(t) + \sum_i^{\text{占有軌道}} \sum_a^{\text{非占有軌道}} \Phi_i^a C_i^a(t)$$

と表す。

本研究ではこのTDCIS法によって平均場近似を超えた電子ダイナミクスの記述を固体でも実現する。TDCIS法で現れる位置演算子の行列要素は、結晶運動量に対して連続になるように軌道の位相因子を取ることで、適切に評価できる[5]。図は一次元水素鎖モデルのHF基底状態のバンド構造と位置演算子の行列要素であり、位相を取りなおすことで右図赤線のように結晶運動量について連続な行列要素を得ることができる。講演では固体に合わせた理論構築の詳細と時間発展への適用結果を報告する。

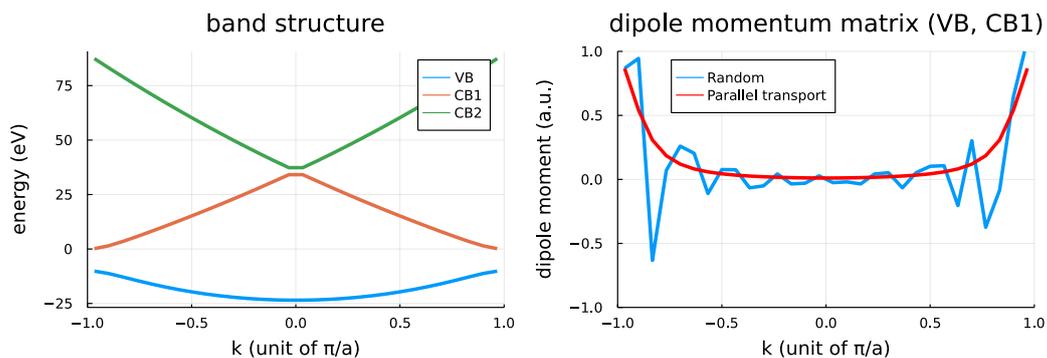


図 (左)一次元水素鎖モデルのHF基底状態のバンド構造。(右)VBとCB1の位置演算子の行列要素。

青線は位相因子を選ばずに計算した行列要素で、赤線は位相を取り直して計算した行列要素。

[1] T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **91**, 023147 (2015).

[2] T. Ikemachi, Y. Shinohara, T. Sato, J. Yumoto, M. Kuwata-Gonokami, and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **98**, 023415 (2018).

[3] T. Sato, T. Teramura, and K. L. Ishikawa, Appl. Sci. **8**, 430 (2018).

[4] T. Teramura, T. Sato, and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **100**, 043402 (2019).

[5] L. Yue and M. B. Gaarde, Phys. Rev. A **101**, 053411 (2020).