

# 曲線座標による多配置時間依存ハートリーフック法の数値実装

## Numerical implementation of the multiconfiguration time-dependent Hartree-Fock method on curvilinear coordinates

東大院工<sup>1</sup>, <sup>○</sup>(M2) 磯野 悠太郎<sup>1</sup>, 佐藤 健<sup>1</sup>, 石川 顕一<sup>1</sup>

UTokyo<sup>1</sup>, <sup>○</sup>Yutaro Isono<sup>1</sup>, Takeshi Sato<sup>1</sup>, Kenichi L. Ishikawa<sup>1</sup>

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

近年レーザー技術の進歩により、アト秒孤立パルスの発生が可能になってきており、これによって分子中の電子ダイナミクスの観測が報告されるようになった[1]。この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分子や固体中の電子の運動の観測や制御のために広く研究されている。高強度場下における電子の運動は時間依存シュレーディンガー方程式により厳密に記述されるが、その計算コストは電子数に対して指数関数的に増加する。また、イオン化した電子のための大きな計算領域と原子核近傍のポテンシャルを正確に記述するための高解像度の両立も必要となる。さらに、多原子分子系に対しては分子の対称性に頼らない計算手法が求められる。そこで、本研究室は精密に電子ダイナミクスを記述可能な時間依存多配置自己無撞着場法[2]に基づき、十分な計算領域と高解像度を両立する多重解像度グリッド[3]、効率的な吸収境界条件である外部複素スケーリング(ECS)[4]の開発と実装を行ってきた。さらに、曲線座標による時間依存ハートリーフック法(TDHF)の数値実装を報告してきた[5,6]が、本研究では、これを多配置時間依存ハートリーフック(MCTDHF)法による計算ができるように拡張した。吸収境界として ECS を実装し、MCTDHF 法による  $C_2H_2$  分子の高調波スペクトルを計算し、軌道数に関して収束したスペクトルを得ることに成功した (図)。TDHF 法とは異なる結果となっており、電子相関の寄与が重要であると分かる。

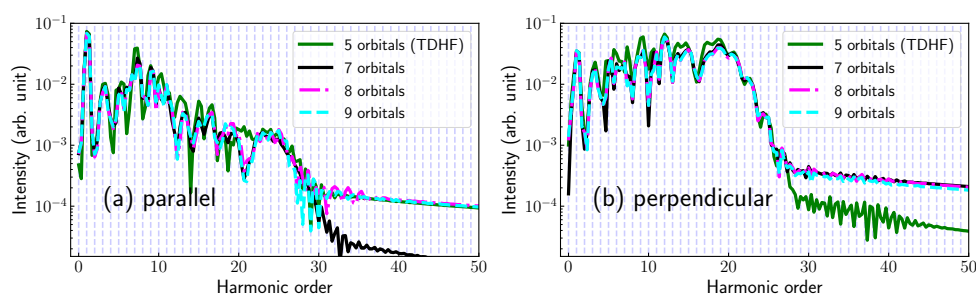


図.  $C_2H_2$  分子に強度  $10^{14} \text{W/cm}^2$  の直線偏光を照射した時の高調波スペクトル。(a) パルスが  $C_2H_2$  分子軸に平行な偏光である場合。(b) パルスが  $C_2H_2$  分子軸に垂直な偏光である場合。

- [1] F. Calegari, D. Ayuso, A. Trabattoni et al, *Science* **346** 6207 (2014)
- [2] T. Sato and K. L. Ishikawa, *Phys Rev A* **91** 023417 (2016)
- [3] R. Sawada, T. Sato and K. L. Ishikawa, *Phys Rev A* **93** 023434 (2016)
- [4] Y. Orimo, T. Sato, A. Scrinzi and K. L. Ishikawa, *Phys Rev A* **97** 023423 (2018)
- [5] 磯野悠太郎、第 80 回応用物理学会秋季学術講演会、北海道大学、2019 年 9 月 18 日 (oral)
- [6] 磯野悠太郎、第 81 回応用物理学会秋季学術講演会、Online、2020 年 9 月 10 日 (oral)