

強レーザー電場下におけるアト秒電子ダイナミクスの第一原理的解析

First-principles analysis on attosecond electron dynamics under strong laser fields

筑波大¹, °佐藤 駿丞¹

Univ. Tsukuba¹, °Shunsuke A. Sato¹

E-mail: ssato@ccs.tsukuba.ac.jp

近年のレーザー技術の発展により、固体中の超高速電子ダイナミクスをアト秒の時間分解能で実験的に調べる事が可能となって来た。このような固体に対する超高速分光実験は、非平衡量子ダイナミクスに関する豊富な微視的情報をもたらす。その一方で、実験結果は固体の複雑な電子構造を反映した難解なものとなる場合が多く、実験結果を直接解釈することが難しいのが現状である。時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく第一原理電子ダイナミクス計算は、このような複雑な固体中の電子ダイナミクスを微視的に解析するための強力なツールであり、光誘起非平衡現象の微視的知見を引き出すために用いられてきた。

右図には TDDFT 計算によって得られた、高強度レーザー照射前後における結晶 Si 内の電子密度分布の変化を示した。レーザー照射前は Si 原子間に電子密度の高い共有結合が形成されているのを確認することができるが、高強度レーザー照射後には高密度励起によって共有結合が破壊されている様子が確認できる。TDDFT 計算を行うことで、このような高強度レーザーが固体中に駆動する非線形・非平衡な電子ダイナミクスを微視的に解析することができる。

本講演では、この TDDFT 計算によりポンプ・プローブ分光法模倣することで固体に対するアト秒過渡吸収分光を直接シミュレーションする方法論を概観する[1]。また、この第一原理ポンプ・プローブ分光法を遷移金属である Ti[2]や磁性体である Co や Ni[3]へ応用することで、高強度超短パルス光が金属中に駆動する電子やスピンのダイナミクスを解析した結果についても紹介する。

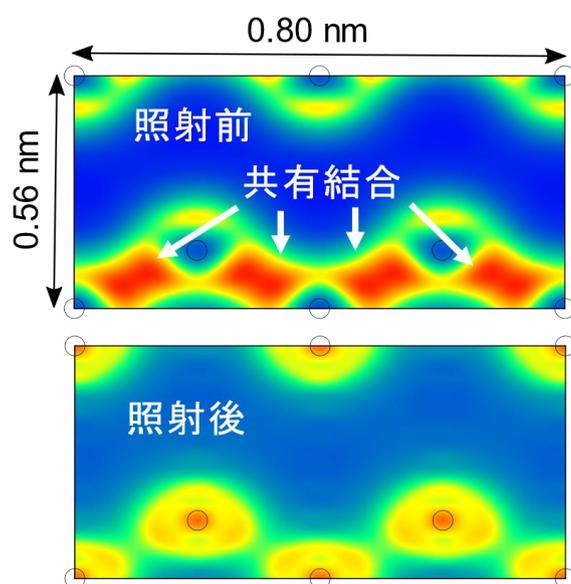


図. TDDFT 計算によって得られた、高強度レーザー照射前後における結晶 Si 内の電子密度の様子。

[1] Shunsuke A. Sato, Comput. Mater. Sci. 194, 110274 (2021)

[2] M. Volkov, S. A. Sato, F. Schlaepfer, L. Kasmi, N. Hartmann, M. Lucchini, L. Gallmann, A. Rubio, U. Keller, Nature Physics 15, 1145 (2019)

[3] Shunsuke A. Sato, , Electron. Struct. 4, 014007 (2022)