

erfgau ポテンシャルを用いた高強度レーザー場中の実時間第一原理計算

Real-Time *Ab Initio* Simulations in Intense Laser Fields Based on an Erfgau Potential東大院工¹, [○]織茂悠貴¹, 佐藤健¹, 石川顕一¹The Univ. of Tokyo¹, [○]Yuki Orimo¹, Takeshi Sato¹, Kenichi L. Ishikawa¹

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

高強度・超短レーザーパルスに照射された分子中の電子ダイナミクスを明らかにするため、我々は多配置波動関数理論の開発[1]やそのアダプティブ有限要素法による実装[2]を行ってきた。原子と比較すると分子では原子核のクーロンポテンシャルが複数の位置に特異点を持ち、複雑な形をするため、空間の離散化には特別な工夫が必要となる。本研究ではこの難しさを回避するために特異点がなく滑らかな近似ポテンシャル *erfgau*[3]を実時間第一原理計算に用いることを提案する。

erfgau は $c\exp(-\alpha r^2) + \text{erf}(\mu r)/r$ という誤差関数とガウス関数を組み合わせた式でクーロンポテンシャル($1/r$)を近似する。パラメータ(c, α, μ)の決め方は多数あるが、本研究では文献[4]に従い、 μ のみを近似の程度を決定するパラメータとして残した。ポテンシャルを計算しやすいもので代用する有力な手法には擬ポテンシャルがあるが、それに対する *erfgau* の利点は内殻電子までアクティブな電子として扱える点にあり、より広範な現象のシミュレーションに使える汎用性を期待できる。*erfgau* ポテンシャルの実時間第一原理計算での性質を確認するためいくつかの数値計算を行った。図 1(a) は 3 次元直交座標グリッド上の複数の位置で計算した *erfgau* による H 原子の基底状態エネルギーである。ポテンシャルが滑らかなため、原子の位置によらず相対誤差は 10^{-3} 以下で、任意の位置に原子が配置される分子でも精度良く計算できると期待できる。図 1(b)は Ne 原子の高次高調波スペクトルを示している。*erfgau* と正確なクーロンポテンシャルの結果はほぼ完璧に一致しており、文献[4]で示された基底状態だけでなく、励起やイオン化、多電子系にも応用できることが分かる。講演では実際に分子計算に適用した事例を示す。

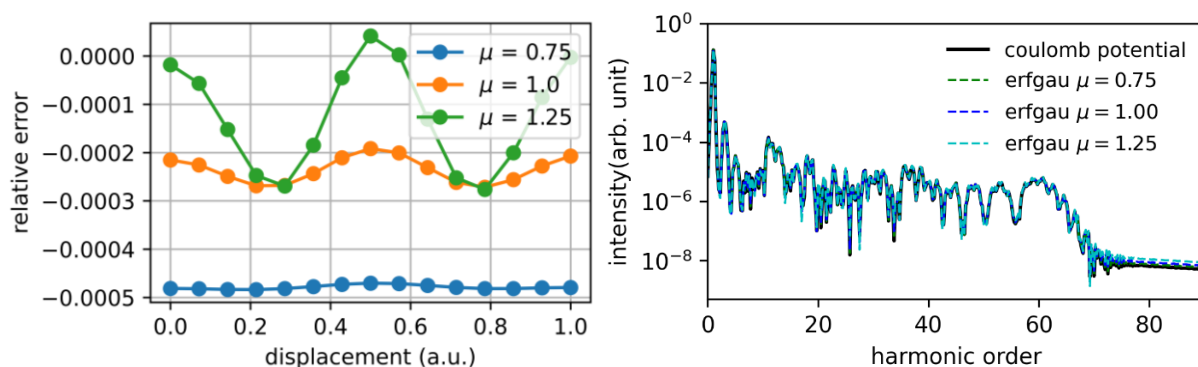


図 1 (a) 3 次元直交座標グリッドで計算した *erfgau* による H 原子の基底状態エネルギーの相対誤差 (厳密解との比較)。x 軸は原点からの変位。 μ が大きいほど *erfgau* はクーロンポテンシャルに近づく。
(b) 波長 800nm の高強度パルスに照射した Ne 原子からの高次高調波スペクトル

[1] T. Sato, K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A **91**, 023417 (2015). [2] Y. Orimo, *et al.*, arXiv:2301.02387 (2023)

[3] J. Toulouse, *et al.*, Phys. Rev. A **70**, 062505 (2004). [4] C. E. González-Espinoza, *et al.*, Theor. Chem. Acc. **135**, 256 (2016).