

時間依存多配置波動関数理論に基づく第一原理計算からの 光電子波束の振幅及び位相の抽出

Extraction of Amplitudes and Phases of Photoelectron Wave Packets from First-Principles Simulations

Based on the Time-Dependent Multiconfiguration Self-Consistent Field Methods

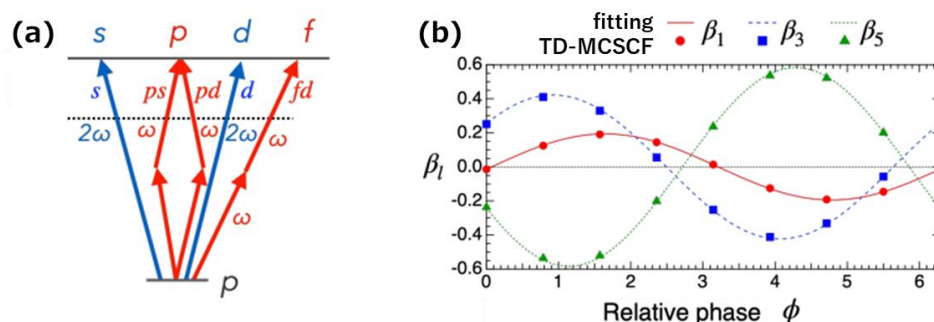
東大院工¹, 東北大多元研², [○]織茂 悠貴¹, トウグス オユーンビレグ¹, 佐藤 健¹,
ユ デヒョン², 上田 潔², 石川 顕一¹

Univ. Tokyo¹, IMRAM, Tohoku Univ.², [○]Yuki Orimo¹, Oyunbileg Tugs¹, Takeshi Sato¹,
Daehyun You², Kiyoshi Ueda², Kenichi L. Ishikawa¹

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

先端的な自由電子レーザーを用いることで相対位相が制御可能な二色のコヒーレントな極端紫外パルスを発生させ、光電子角度分布(PAD)のコヒーレント制御を行うことができる[1,2,3]。時間依存多配置波動関数理論(TD-MCSCF)[4]はコヒーレント制御実験で起こるイオン化ダイナミクスを正確にシミュレーションできる強力な手法であるが、光イオン化過程を完全に決定するイオン化経路ごとの光電子波束の振幅と位相を計算結果から抽出することは容易ではない。そこで、本研究は多配置波動関数理論の枠組みで記述される多電子波動関数からイオン化経路ごとの光電子波束の振幅と位相を抽出する方法を提案する。

提案手法のアイデアは多配置波動関数理論によって磁気量子数ごとに分解した PAD を計算し、それぞれの磁気量子数からの寄与を個別に解析するというものである。これにより、磁気量子数について足し合わせた通常の PAD を解析する場合に比べ、情報量を増やすことができる。各磁気量子数の PAD から 6 次までの非対称パラメータ(PAD をルジャンドル多項式に射影した量)を求め、それらを二色間の相対位相の関数としてグローバルフィッティングすることで、イオン化経路ごとの振幅と位相を完全に決定することができる。この方法を Ne 原子の二色パルス(ω - 2ω パルス)によるイオン化(図 a)に適用し、抽出した振幅と位相が非対称パラメータをほぼ完全に再現すること(図 b)、また Wigner-Eckart の定理から期待される関係を精度良く満たすことを実証した。



(a) ω - 2ω パルスによる Ne 原子のイオン化の概念図 (b) 非対称パラメータ β_l の相対位相依存性。TD-MCSCF 法の結果と抽出した振幅と位相から再構成した値が良く一致している。

[1] B. Diviacco, *et al.*, In Proceedings of the International Conference on Particle Accelerators 2011, page 3278 (2011) [2] M. D Fraia, *et al.*, Phys. Rev. Lett 123, 213904 (2019) [3] D. You, *et al.*, Phys. Rev. X 10, 031070 (2020) [4] K. L. Ishikawa, T. Sato, J. Sel. Topics Quantum Electron., 21(5):8700916 (2015)