

強レーザー場における原子・分子過程に 関する時間発展計算法

数理物質科学研究科・物性分子工学専攻

全 暁民

プロジェクトメンバー

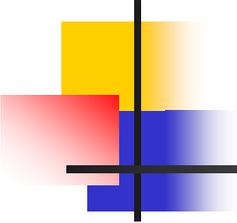
戸嶋 信幸 (数理物質科学研究科、物性分子工学専攻)

全 暁民 (数理物質科学研究科、CCS研究員)

白濱 丈詞 (数理物質科学研究科・D院生)

金 英俊 (数理物質科学研究科・D院生)



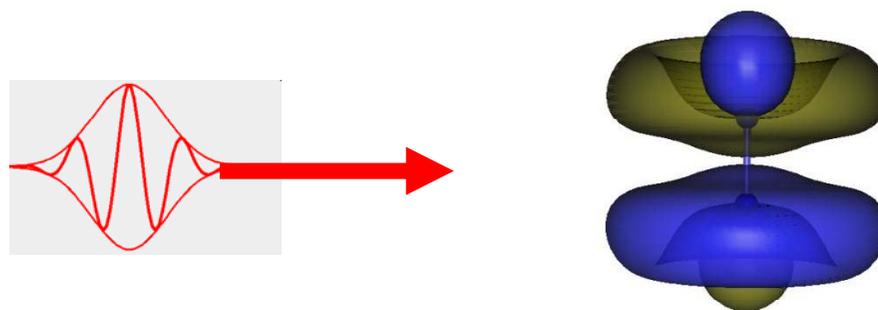


研究概要

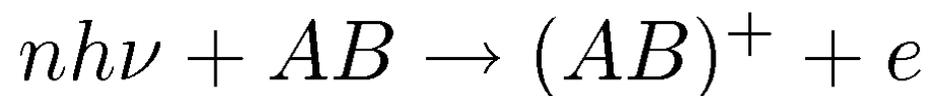
強レーザー場における原子・分子過程を
大規模数値計算で解明と制御

- (1) 強レーザーにおける二原子分子の電離過程の研究
- (2) 周期外場によって、原子構造の解明と制御

(1) 二原子分子の電離過程

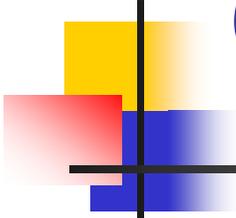


強レーザー場 (10^{14} W/cm²).



物理の過程:

- 多光子電子過程
- トンネル電離過程
- 分子アライメントの依存性



(1) 計算手法

時間依存のSchrodinger方程式を直接数値計算で解き、過程を解明

汎用の計算方法

と

専用の計算方法

(実時間・実空間密度汎関数)

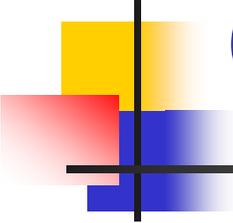
(楕円座標)

専用の計算方法の特徴： 精度高い、効率も高い

長期目標： 多電子二原子分子の動的過程が研究できる方法を開発

(1) 完成した二次元の計算コードで水素分子イオンの多光子電離の研究
(水素分子イオンの多光子電離の実験解明を研究の目的である)

(2) 単電子の三次元の計算コードを開発
(アライメント依存性を研究したい)



(1) 計算の流れ

(1) 時間依存しないベースを用意: $H_0(\eta_1, \eta_2)\Psi = E\Psi$

(Lapack の DSYEVX コードを利用)

(2) 時間発展: $i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H(t)\Psi(t)$

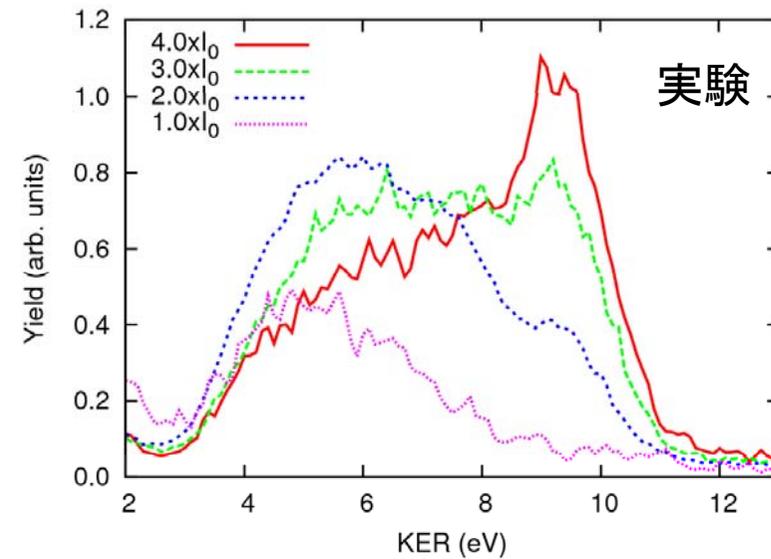
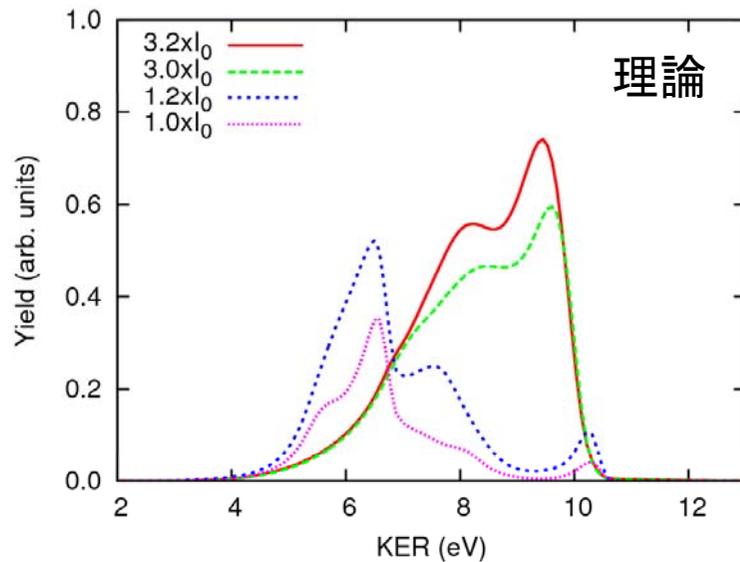
(Blas の ZGEMV コードを利用して、数万から百万回)

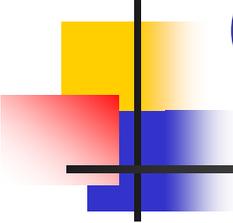
二次元の計算コードを完成し、T2Kで行った。

(1) 研究結果

計算結果と実験を比べると、新しい電離メカニズムを確認した。

励起状態の寄与を解明した。





(2) 原子構造の解明と制御

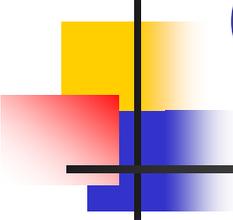
弱い外場: 原子構造の観測
強い外場: 原子構造の壊れ
適当な外場: 原子構造の制御



原子のエネルギー構造

物理の過程:

Pump-Probe の手法で 様々の動的の過程を制御と観測
例えば、光吸収過程を利用して、光の物質透過を制御する。



(2) 計算手法と長期目標

従来の時間依存しない(Fourier Floquet)方法 $H_F \Psi = E \Psi$

計算量は 空間離散の点数 N と光子の数 n の3乗に依存するので、もし N 一万、 n 百とすると、膨大な計算になり、実現不可能。

新しい時間依存計算方法

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = H(t) \Psi(t), \quad C(t) = \frac{1}{T} \int_0^T \langle \Psi(t) | \Psi(t + \tau) \rangle d\tau$$

計算量は空間離散点数 N の二乗と光子数 n の一乗に依存するので、計算可能。

原理として、周期磁場における水素原子の光吸収過程を研究

(2) 計算の流れ

C(t) 積分の要素をMPIで計算し

時間発展:

OpenMP →

```
Do j
  Call ZGEMV
End do
情報交換
Do j
  Call ZGEMV
End do
```

```
Do  $\tau$  ! MPI
   $\langle \Psi(t) | \Psi(t + \tau) \rangle$ 
```

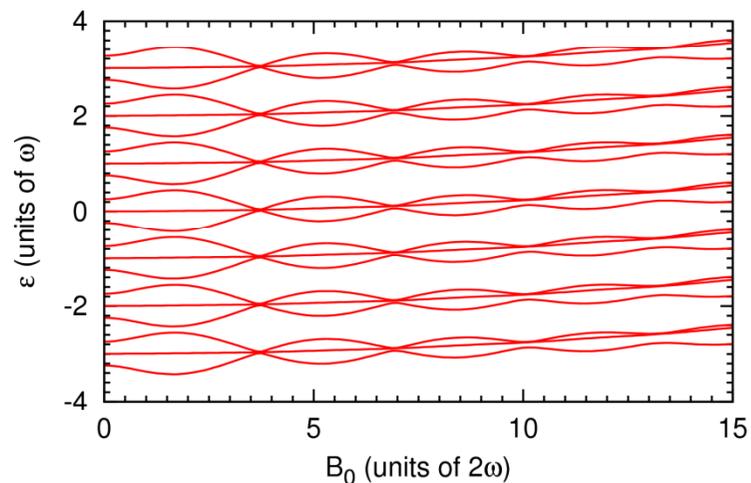
$$\text{Do } t \\ i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = H(t) \Psi(t),$$

(2) 研究結果

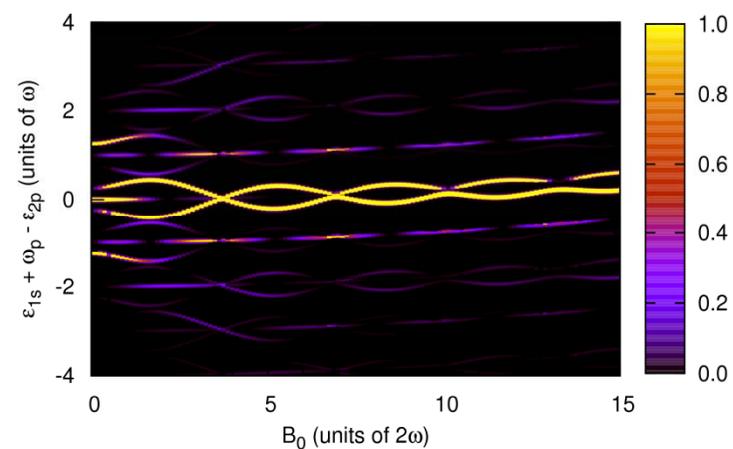
2-1: 周期磁場によって、水素原子の光吸収過程の制御

加えた周期磁場の強度によって、吸収するかが制御できる。

エネルギーの構造



光吸収スペクトル

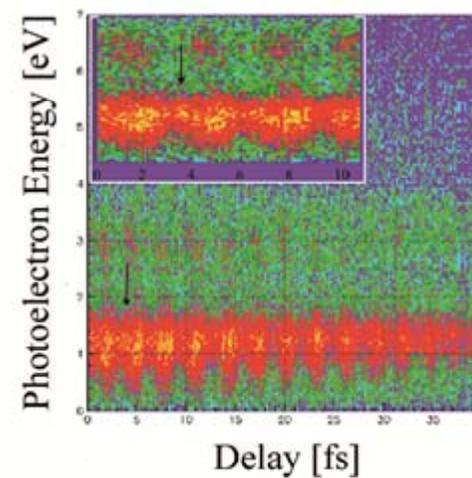
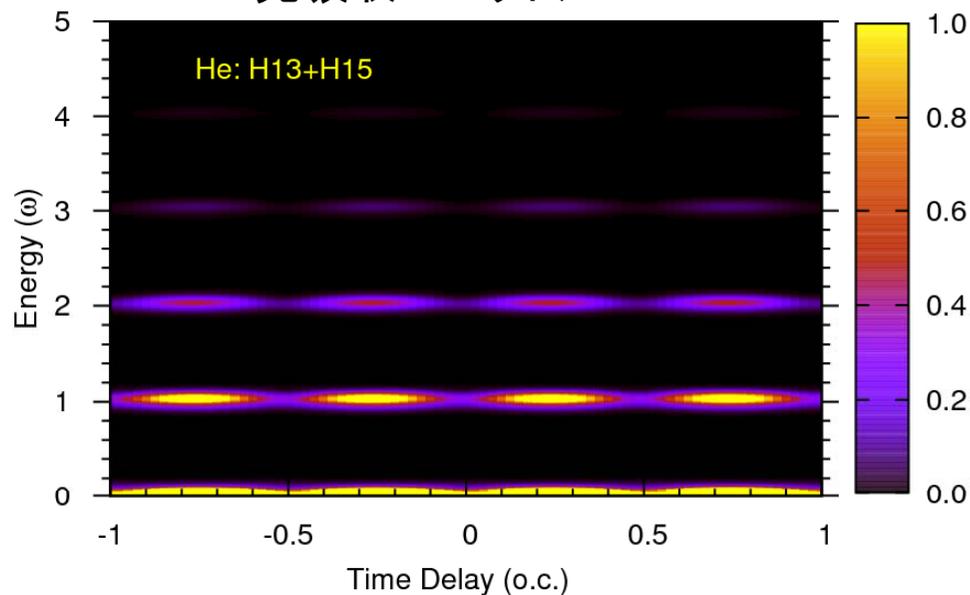


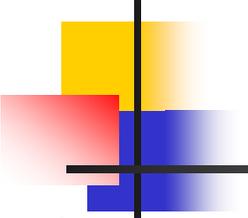
(2) 研究結果

2-1: 赤外線によって、ヘリウム原子の光吸収過程の制御

IR レーザーとアト秒レーザーの遅延時刻によって、
吸収するかが制御できる。

光吸収スペクトル





発表論文リスト

1. Xiao-Min Tong, and Nobuyuki Toshima,
Infrared laser assisted photoionization of helium by a coherent extreme ultraviolet light
Phys. Rev. A **81** (2010) 043429.
2. X. M. Tong, P. Ranitovic, C. L. Cocke and N. Toshima,
Mechanisms of Infrared Laser Assisted Atomic Ionization by Attosecond Pulses
Phys. Rev. A **81** (2010) 021404(R).
3. P. Ranitovic, Xiao-Min Tong, B. Gramkow, *et al.*,
IR-Assisted Ionization of Helium by Attosecond XUV Radiation
J. New Phys. **12** (2010) 013008.
4. Y. J. Jin, X. M. Tong and N. Toshima,
Enhanced ionization of hydrogen molecular ions in an intense laser field via a multiphoton resonance
Phys. Rev. A **81** (2010) 013408.
5. T. Shirahama, X. M. Tong, K. Hino, and N. Toshima,
Atomic photoabsorption process controlled by static and oscillating magnetic fields
Phys. Rev. A **80** (2009) 043414.