

受付 ID	16a4
分野	物質科学

## 超短パルス強レーザー場における原子・分子過程の理論計算

### Theoretical Simulation on Atomic and Molecular Processes in Ultra-Short Intense Laser Fields

全 曉民 (TONG, Xiao-Min)  
筑波大学計算科学研究センター

#### 1. 研究目的

超短パルス高強度2色中赤外線及び2色円偏光レーザー場中の原子・分子ダイナミクスのメカニズムを直接解法に基づく大規模な数値計算によって量子力学的に解明するのが本研究の目的である。特に、2色レーザー場中原子電離過程と2色レーザー偏光の向きの関係を探索する。

#### 2. 研究成果の内容

- (1) 2色円偏光レーザー場中原子電離過程を大規模な数値計算で解明し、そのメカニズムを利用して、2色レーザーの強度による電離過程の制御方法を提案した。その提案は実験で確認された。研究結果はアメリカの実験グループとの共同研究で **Physical Review A** に発表した。
- (2) 強レーザー場における水素原子の電離電子スペクトルを我々の計算精度の高い方法で計算し、その結果を実験と比べてレーザー強度の測定方法を開発した。従来の測定方法(誤差 10%)と比べて、誤差は 2%の範囲内で実現された。その研究結果はオーストラリアの実験グループとの共同研究でこの分野で有名な雑誌、**Physical Review Letters** に発表した。
- (3) 新しい FFT での時間依存密度汎関数の計算方法を開発した。空間分点が数億ぐらいの多原子系の問題を計算できるようになった。将来多電子系の動的過程を解明することが可能になる。

#### 3. 学際共同利用として実施した意義

理論研究は大規模な数値計算が必要である。もし、HA-PACS を使用しないとその研究はできなくなってしまった。

#### 4. 今後の展望

新しい計算コードを Oakforest-PACS に移植して、様々な強レーザー場における原子、分子、クラスターの過程を解明し、その理解の上に、外場による動的過程の制御方法を探索する。

5. 成果発表

(1) 学術論文 (HA-PACS の謝辞付け論文)

- 1) F. P. Sturm, X. M. Tong, A. Palacios, T. W. Wright, I. Zalyubovskaya, D. Ray, N. Shivaram, F. Martin, A. Belkacem, P. Ranitovic, and Th. Weber “*Mapping and Controlling Ultrafast Dynamics of Highly Excited H<sub>2</sub> Molecules by VUV-IR Pump-Probe Schemes*”, Phys. Rev. A **95**, 012501:1-7 (2017)
- 2) WC Wallace, O.Ghafur, Satya Sainadh U, JE Calvert, C Khurmi, DE Laban, MG Pullen, K Bartschat, AN Grum-Grzhimailo, D Wells, HM Quiney, XM Tong, IV Litvinyuk, RT Sang, and D Kielinski, “*Precise and Accurate Measurements of Strong-Field Photoionization and a Transferable Laser Intensity Calibration Standard*”, Phys. Rev. Lett. **117**, 053001:1-5 (2016)
- 3) H Xu, HT Hu, XM Tong, P Liu, Peng, RX Li, RT Sang, and IV Litvinyuk, “*Coherent control of the dissociation probability of H<sub>2</sub><sup>+</sup> in  $\omega$ -3 $\omega$  two-color fields*”, Phys. Rev. A **93**, 063416:1-5 (2016)
- 4) CA Mancuso, DD Hickstein, KM Dorney, JL Ellis, E Hasovic, R Knut, P Grychtol, C Gentry, M Gopalakrishnan, D Zusin, FJ Dollar, XM Tong, D Milosevic, W Becker, HC Kapteyn, MM Murnane, “*Controlling electron-ion rescattering in two-color circularly polarized femtosecond laser fields*”, Phys. Rev. A **93**, 053406:1-13 (2016)

(2) 学会発表

- 1) X. M. Tong, N. Toshima, “*Strong Field Ionization of N<sub>2</sub> Molecules in Two-Coulour Circularly Polarized Laser Field*”, 12<sup>th</sup> European Conference on Atoms and Molecules and Photons, Sept. 5-9, 2016, Frankfurt, Germany.
- 2) J. Calvert, H. Xu, A. Palmer, D. Laban, I. Litvinyuk, D. Kielinski, R. Sang, R. Glover, X. M. Tong, V. Dolmatov, T. Kheifets, K. Bartschat, “*The interaction of excited atoms and few-cycle laser pulses*”, APS Division of Atomic and Molecular Physics Meeting, May 23-27, 2016, Providence, Rhode Island, abstract K1:00049

(3) その他

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS		1350 (32 nodes)
HA-PACS/TCA		
COMA		750 (16 nodes)
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		