

受付 ID	17a28
分野	物質科学

強レーザー場における原子・分子動的過程の理論計算
Theoretical Simulation on Atomic and Molecular Dynamic Processes in
Strong 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

短パルス強レーザー場における原子・分子動的過程を大規模数値計算によって解明するのが本研究の目的である。特に2色円偏光レーザー場中の分子に対して、直接解法を適用するには空間分点の数が**数百万**から**数十億**必要であるため、従来の計算方法では実行が不可能になった。この問題解決のために高速フーリエ変換(FFT)を利用した新たな時間依存密度汎関数計算法を開発する。この計算方法により、2色円偏光強レーザー場におけるN₂分子の電離電子運動量分布と、CO₂分子軸と偏光平面のなす角の関係を解明することができる。

2. 研究成果の内容

- (1) 新計算方法で強レーザー場における原子多重電離過程を調べた。従来の実験結果と理論計算によって、レーザー強度上げると、二重電離の割合も上げる。我々の計算結果によると、ある強度の領域でレーザー強度下げると、二重電離の割合が上がる。この異常な現象をスペインの実験グループに報告して、実験でこの現象は確認された。本研究は国際共同研究の成果として、Physical Review A に発表した。
- (2) ウィン工科大学の共同研究者が反陽子とヘリウム原子の衝突によってエネルギーの損失について計算するとき、異常な入射エネルギーの依存性が見つかった。その依存性を確認のために私と連絡して、我々の計算手法で反陽子とヘリウム原子の衝突によってエネルギーの損失についていろいろの器用を調べると、異常な入射エネルギーの依存性は計算の収束の原因を確認した。もう具体的というと、電離された電子のエネルギーの分布が数 meV から数百 keV, 幅広い範囲であるので、収束な計算が難しいである。それに対して、我々は低電子エネルギーと高電子エネルギーを中心として2回の計算をやって、収束性が良い計算を行った。先方は我々のような大規模な収束計算を行った。予測な入射エネルギーの依存性を再現できた。共同研究の結果を論文に取りまとめている。

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。特に、反陽子の計算が入射エネルギーと入射パラメタが多すぎて、スパコンを使用しないとその研究はできなくなってしまう。

4. 今後の展望

- (1) 今開発している FFT で新時間依存密度汎関数計算法を改善し、特に, Surface Flux の方法を利用して、外に電離された電子の詳しい情報を計算できるコードを開発すること。
- (2) 従来, 原子に対して有効な計算コードを OFP への移植し、楕円偏光や2色円偏光強レーザー場における原子過程を大規模な計算で新物理現象を調べること。

5. 成果発表

(1) 学術論文 (謝辞付け論文)

- 1) M. G. Pullen, B. Wolter, X. Wang, X. M. Tong, M. Sclafani, M. Baudisch, H. Pires, C. D. Schröter, J. Ullrich, T. Pfeifer, R. Moshhammer, J. H. Eberly, and J. Biegert, “Transition from nonsequential to sequential double ionization in many-electron systems”, Phys. Rev. A **96**, 033401 (2017).
- 2) H. Li, X. Gong, K. Lin, R. de Vivie-Riedle, X.M. Tong, J. Wu, and M.F. Kling, “Sub-cycle directional control of the dissociative ionization of H₂ in tailored femtosecond laser fields”, J. Phys. B: At. Mol. Opt. **50**, 172001 (2017).
- 3) C. A. Mancuso, K. M. Dorney, D. D. Hickstein, J. L. Chaloupka, X. M. Tong, J. L. Ellis, H. C. Kapteyn, and M. M. Murnane, “Observation of ionization enhancement in two-color circularly polarized laser fields”, Phys. Rev. A **96**, 023402 (2017).
- 4) X. M. Tong, “A three-dimensional time-dependent Schrödinger equation solver: An application to hydrogen atoms in an elliptical laser field”, J. Phys. B: At. Mol. Opt. **50**, 144004 (2017).

(2) 学会発表

- 1) X. M. Tong, “Ionization of Atoms and Di-Atomic Molecules in Two Color Circularly Polarized Intense Laser Fields”, The 10th Asian Symposium on Intense Laser Science, Mar. 10~13, 2018, United Arab Emirates, (招待講演)
- 2) X. M. Tong, “A New FFT based TDDFT method for isolated systems in strong field”, 2nd International Conference on Matter and Radiation at Extremes, June 26-30, 2017, Beijing, China (招待講演)

(3) その他

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
HA-PACS/TCA	○	16000	
COMA	○	28800	
Oakforest-PACS	○	32000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			