

## 強レーザー場における原子分子動的過程の理論研究

### Theoretical studies on the dynamics of atoms, molecules in a strong laser field

全 曉民 (Xiao-Min Tong)

筑波大学・計算科学研究センター

#### 1. 研究目的

- (1) **計算手法の開発**：孤立系に対して、高速フーリエ変換(FFT)を利用して新たな時間依存密度汎関数計算法を開発することを研究の目的の一つである。
- (2) **物理過程の解明**：大規模な数値計算によって、短パルス強レーザー場における様々な原子・分子動的過程の解明するのを本研究の目的の一つである。

#### 2. 研究成果の内容：

- (1) 開発したFFTにより新しい時間依存密度汎関数計算方法をスーパーコンピューター (Oakforest-PACS [OFP]) に移植し、その計算方法で赤外線強レーザー場における酸素分子電離過程を調べた。特に電離確率と軟X線と赤外線強レーザー場偏光向きとの依存性や二つパルスの時間遅延との関係を解明した。我々の計算でアメリカローレンス・バークレー国立研究所での実験結果を解釈した。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) 新計算方法で、短パルス軟X線レーザーにより、重水素分子電離に伴う解離過程について調べた。スペインの理論グループの理論計算結果とアメリカの実験グループの観測結果と比べて、高い励起状態における電子相関の寄与を明らかにした。特に時間遅延の手法で、電子相関と原子イオン間距離の関係を始めて明らかにした。本研究は多国国際共同研究の成果として、**Physical Review A**に発表した。
- (3) 我々の計算手法で楕円偏光強レーザー場中の原子電離過程について調べた。特に電離確率と電離と楕円偏光平面とのなす角の関係を詳しく計算した。その研究結果を2019年度国際電子原子光衝突学会で発表する予定である。

#### 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、強レーザーにおける分子の動的過程について、計算量が多かった。また、普通の線偏光レーザー場における原子の過程は対称性を利用すると2次元の時間依存の問題だったが、楕円偏光の場合は3次元の時間依存の問題になって、計算量がさらに増えて、スパコンが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

最近、Self-Interaction-Correction を含めている新しい交換相関関数を導入し、DFT の計算精度を改善した。その方法も TDDFT 計算方法にも導入すると、より、計算精度高結果を得るのを期待する。実験結果と大規模な数値計算と比べて、分子瞬間的な構造を得るのは今後の研究目的の一つである。また、今の OFP で使っている計算コードを GPU 化で、Cygnus でもっと複雑な問題に対して、計算できるコードを開発すること。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- 1) P Ranitovic, FP Sturm, XM Tong, TW Wright, D Ray, I Zalyubovskya, N Shivaram, A Belkacem, D Slaughter, Th Weber, “Attosecond coherent control of oxygen dissociation by XUV-IR laser fields using three-dimensional momentum imaging”, Phys. Rev. A **98**, 013410:1:11 (2018).
- 2) S Borbely, XM Tong, S Nagele, J Feist, I Brezinov, F Lackner, L Nagy, K Tokesi, and J Burgdorfer, “Electron correlations in the antiproton energy-loss distribution in He”, Phys. Rev. A **98**, 012707:1:12 (2018).
- 3) L Martin, RY Bello, CW Hogle, A Palacios, XM Tong, JL Sanz-Vicario, T Jahnke, M Schöffler, R Dörner, Th Weber, F Martín, HC Kapteyn, MM Murnane, and P Ranitovic, “Revealing the role of electron-electron correlations by mapping dissociation of highly excited  $D_2^+$  using ultrashort XUV pulses”, Phys. Rev. A **97**, 062508 (2018).
- 4) I Floss, C Lemell, G Wachter, V Smejkal, SA Sato, XM Tong, K Yabana, and J Burgdörfer, “Ab initio multiscale simulation of high-order harmonic generation in solids”, Phys. Rev. A **97**, 011401(R):1-5 (2018).

(2) 学会発表

- 1) BD Esry, et. al., “Comparing the performance of time-dependent-Schrödinger-equation solvers for the 800-nm, one-electron-atom, strong-field problem”, 49<sup>th</sup> Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, May 28-June 1, 2018, Ft, Lauderdale, FL, USA
- 2) XM Tong, “Theoretical Studies on Antiproton Captured by H and He atoms”, Workshop to discuss PUMA experiment and its future possibilities, Aug. 24, 2018, Osaka University

(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
COMA	○	22,720	0
Oakforest-PACS	○	25,600	0
※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。			