

# 応用物理学セミナー

2018年4月20日(金) 4限目14:45-16:15 (A420会議室)

## 第一原理計算から探るレーザー場中にある物質の超高速非摂動現象

量子科学技術研究開発機構 (QST), 関西光科学研究所 (KPSI),  
超高速光物性研究グループ

乙部 智仁 主幹研究員

近年のレーザー技術の発展により  $1 \text{ V/\AA}$  を超える電場を  $5 \text{ fs}$  以下 ( $1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$ ) の時間だけ物質に与える事が可能になっている。 $1 \text{ V/\AA}$  というのは物質中で電子を感じるクーロン場と同程度の電場であり、 $5 \text{ fs}$  以下はエネルギー緩和や衝突過程が起きるより早い時間スケールである。21世紀に入ると高強度極短パルスレーザーを原子・分子に照射することでアト秒 ( $1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$ ) 領域のコヒーレントパルス光を発生させることも可能となっている[1]。アト秒は電子運動の時間スケールであり、アト秒パルス光とは電子ダイナミクスの観測・制御に繋がる技術である。

アト秒パルスで電子ダイナミクスを見るには分光及び光電子分光を用いた実験になるが、そのための理論・シミュレーション技術は未だ未完成な部分が多い。特に高強度レーザーによって駆動された物質は非摂動な振る舞いをするため非常に高精度な計算も必要となってくる。

講演者はこれまでに時間依存密度汎関数理論 (TD-DFT) [2] の実時間計算手法の開発及び利用研究を進めてきた[3,4]。TD-DFTとはバンド計算や量子化学計算に用いられる密度汎関数理論 (DFT) を時間変化する系に拡張した理論である。TD-DFTの基礎方程式である時間依存 Kohn-Sham (TD-KS) 方程式を実時間で解く事で電子の非線形ダイナミクスを原子位置とレーザーパラメータのみから予測する事が可能となる。更に最近ではTD-KS方程式と電磁場を記述する Maxwell方程式を融合した多階層シミュレーション手法を開発し、電子ダイナミクスが電磁場に与える影響やマクロな電子励起状態分布の記述も可能とした[5]。

本講演では上記計算手法により得られたアト秒分光理論やレーザー加工の初期過程に対する新たな知見について紹介し、超高速非摂動現象という新たな研究領域の可能性について議論する。

- [1] M. Hentschel, R. Klenberger, Ch. Spielmann, G. A. Reider, N. Milosevic, T. Brabec, U. Heinzmann, M. Drescher, and F. Krausz, *Nature (London)* **414**, 509 (2001).
- [2] E. Runge and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 997 (1984).
- [3] T. Otobe, M. Yamagiwa, J. -I. Iwata, K. Yabana, T. Makatsukasa, and G. F. Bertsch, *Phys. Rev. B* **77**, 165104 (2008).
- [4] T. Otobe, Y. Shinohara, S. A. Sato, and K. Yabana, *Phys. Rev. B* **93**, 045124 (2016).
- [5] K. Yabana, T. Sugiyama, Y. Shinohara, T. Otobe, and G. F. Bertsch, *Phys. Rev. B* **85**, 045134 (2012).

連絡先：応用物理コース

小野 (shota\_o@gifu-u.ac.jp)、近藤 (skondo@gifu-u.ac.jp)