

課題名 (タイトル) :

分子軌道法と強光子場物理の融合

利用者氏名 : 金井 恒人

所属 : 和光研究所 基幹研究所 緑川レーザー物理工学研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係：  
高次高調波発生は、極端紫外・軟 X 線領域におけるアト秒パルスを得る手法をして確立した地位を得た。申請者やその共同研究者は、このパルスをを用い、極端紫外・軟 X 線領域の強光子場における新しい超高速現象を次々と実験的に発見しており、従来の静的な取り扱いを超えた新しい理論的な枠組みを構築することが必要になってきている。本研究では、理研のスーパーコンピュータ上で実行可能な確立された分子軌道法とアト秒ダイナミクスの計算手法を融合し、高次高調波発生を用いた光物性研究の理論的な枠組みの構築を目的とする。
2. 具体的な利用内容、計算方法：  
2 原子分子などの小さな分子に関しては、SAC-CI 法、EOM-CCSD 法を用いて多くの励起状態を高精度に計算し、実験的に観測された原子・分子、そして電子のアト秒ダイナミクスを第一原理的に理解することを目指す。タンパク質等の多原子分子や凝縮系等の複雑な系に関しては TD-DFT 法等のモデル計算を行い、アト秒パルスとの相互作用を予測または再現することを目指す。
3. 結果：  
2 原子分子とアト秒パルスの相互作用について量子力学的な計算を行い、実験結果に主要な寄与をする量子経路を特定することができた。
4. まとめ：  
本手法の有効性を 2 原子分子とアト秒パルスの相互作用に対して示すことが出来た。
5. 今後の計画・展望：  
本手法の原理実証に引き続き、今後は他の小さな分子、さらにはタンパク質や凝縮系などの複雑な系についても適用し、実験結果と比較する計画である。
6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容：  
これまでには、いくつかの小さな分子とアト秒パルスの相互作用を計算機上で再現できた。本手法を他の小さな分子、タンパク質や凝縮系などの複雑な系についても適用して、実験結果と比較する必要がある。
7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由：  
本研究は簡易利用である。
8. 利用研究成果が無かった場合の理由：  
本課題は平成 21 年度の 1 2 月にスタートしたが、2 ヶ月の利用ですでに結果が得られ初めている。

## 平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

### 【国際会議、学会などでの口頭発表】

[1] 金井 恒人, 須田 亮, 緑川 克美, 「光放出過程と光吸収過程の双対性と高次高調波の周波数上方変換」 2010 年春季 第 57 回 応用物理学関係連合講演会, 2010 年 3 月 20 日, 平塚市.

[2] 金井 恒人, 須田 亮, 緑川 克美, 「光子スペクトルの観測による高次高調波と物質の非線形相互作用の研究」 レーザー学会学術講演会第 30 回年次大会, 2010 年 2 月 4 日, 豊中市.