

スピン non-collinear な TDDFT による電子・スピンドイナミクス の実時間計算

原子力機構 乙部 智仁

Real-time simulation for the electron and spin dynamics by the spin
non-collinear TDDFT

JAEA Tomohito Otobe

強い光と多電子系（原子分子、固体）の相互作用の理論研究は密度汎関数法(DFT)および時間依存 DFT(TDDFT)が主となっている。TDDFT で電子ダイナミクスを記述する時は一般にスピンの自由度は無視して計算を行われる。

しかし、スピン軌道力による縮退の分岐や遷移金属、または磁場や相対論効果が重要となってくる程の高強度場ではスピンを考慮した TDDFT が必要となってくる。本研究では波動関数を 2 成分スピノールで表現し、相対論効果まで含んだ spin non-collinear な時間依存 Kohn-Sham 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ion}} + V_{\text{H}}[\rho] + V_{\text{xc}}[\rho] + V_{\text{ext}}(t) + \sigma \cdot (\tilde{B}_{\text{xc}} + \tilde{B}(t)) + O[1/c^2] \right] \psi(\vec{r}, t)$$

を実時間実空間で解く事で計算対象を大きく広げることを目指している。 σ はパウリのスピン行列、 B_{xc} は相関交換ポテンシャルの non-collinear な成分である。計算では相対論の効果を含む $1/c^2$ の項も考慮した。スピンドイナミクスで重要な交換項はスピンに対するトルクを発生させる Exact-exchange(Exx)を使用した。この TDDFT の拡張により、既存のプログラムでは適応できなかったスピンドイナミクスを含んだ非線形効果や相対論効果の理論研究が可能となった。

我々は簡単な適応例として、比較的弱いレーザー場中での Fe 原子の応答と 10^{16}W/cm^2 程度の高強度レーザーと Ar^{+4} の相互作用についての計算を行った。図 1 に Fe 原子に波長 800nm の超短パルスレーザーを照射したときの双極子モーメントの x、y、z 成分である。偏光は x 方向とし、パルス幅は 2.7fs とした。本来 y、z 成分は 0 か無視できる程小さいが、特に z 方向に比較的大きな双極子モーメン

トを持つことが分かった。これは光の進行方向への電子の振動であり、磁場によるローレンツカに起因した電子運動であると予想される。

図2には磁化の時間変化を示した。レーザー強度が高くなると磁化の変化も大きくなっている。また磁化の変化の仕方がパルスのピーク以降に大きくなり磁場の振動と一致していないことから電子励起等による相関交換項の変化に起因したスピンドYNAMICSであると思われる。

講演では相対論効果や磁場と電子の直接的な相互作用の影響が大きいと予想される 10^{16}W/cm^2 程度の高強度レーザー場中の Ar^{+4} の応答についても発表し、non-collinear な TDDFT の可能性についても議論したい。

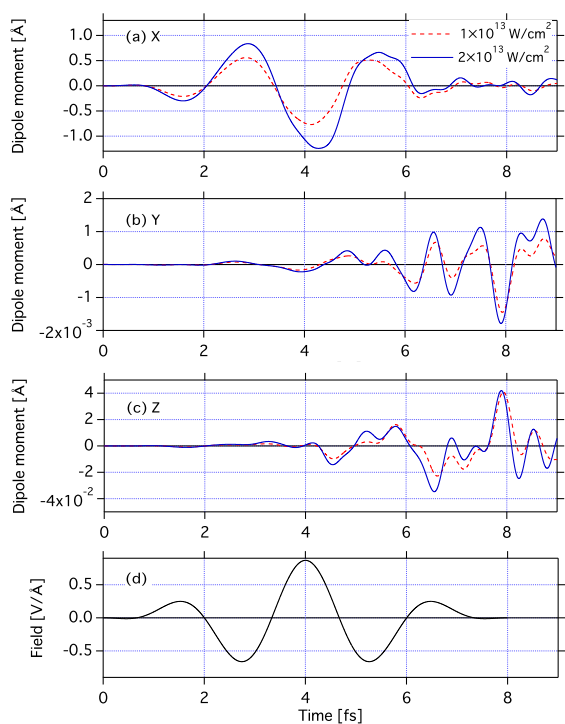


図1 双極子モーメントの時間変化。X方向は電場、Y方向は磁場方向、Z方向は光の進行方向とした。(d)は与えた電場の時間変化。

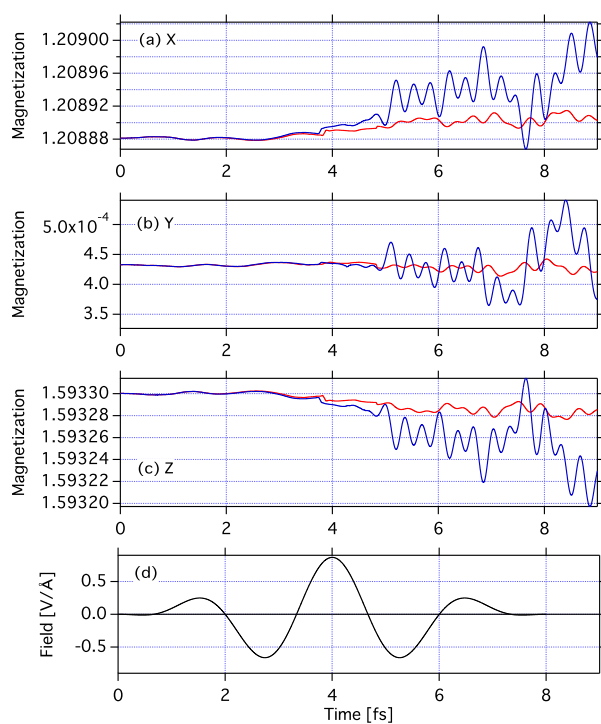


図2 磁化の各方向成分の時間変化。