

Theoretical study on mechanism of solid-state high-harmonic generation

その他のタイトル	固体高次高調波発生メカニズムに関する理論的研究
学位授与年月日	2018-03-22
URL	http://doi.org/10.15083/00077886

論文審査の結果の要旨

氏名 池町 拓也

本論文は英文で全6章からなる。第1章は序論であり、古くから研究されてきた高強度レーザーによる気体原子分子での高次高調波発生と、固体を用いた高次高調波発生に関する最近の実験ならびに理論研究のレビューに続き、本研究の目的が述べられている。第2章では、固体中での光照射後の電子ダイナミクスと高次高調波発生のシミュレーションに必要な理論の枠組みが説明される。第3章では、本論文で用いられた差分法を用いた数値シミュレーション手法の詳細が述べられている。第4章、第5章が本研究の主たる成果であり、第4章では独立電子近似の範囲で、また第5章では電子間クーロン相互作用を考慮した時間依存ハートリー・フォック (TDHF) 法の範囲での、固体における高次高調波発生に関するシミュレーション結果と、結果の解析、および物理的考察が述べられている。第6章では本研究の結論と展望が述べられている。なお補遺 A~F には、本論文で使用した原子単位系 (A), 固体のトンネル励起解析法の詳細 (B), TDHF 法の線形応答 (C), TDHF 方程式と半導体ブロッホ方程式との関係 (D), 固定した交換項による電流密度の表式 (E), ヒューストン基底による TDHF 方程式の表現 (F) が示されている。

気体原子分子に強いレーザー光を照射した時に観測される高次高調波発生は、レーザー強度に依存する非線形物理現象の一つであり、実験、理論の両面で古くから研究され、一定の理解がなされている。一方、2011年に初めて実験的に観測された固体からの高次高調波発生は、観測される高調波のエネルギー上限 (カットオフエネルギー) の電場強度依存性が気体媒質中のそれとは異なることや、高次高調波スペクトルに気体媒質のときには見られないマルチプラトーが現れるといった特徴が見出されているが、研究の歴史が浅く、いまだ十分に理解が進んでいない。本論文は、1次元のモデル結晶に対する数値シミュレーションを用いて、この固体における高次高調波発生機構を明らかにしたものである。

第4章では、最も基本的でシミュレーションの容易な、電子間相互作用を無視した独立電子近似の範囲で、時間依存シュレディンガー方程式を解くことで、高次高調波発生をシミュレーションしている。その際、先行研究のように基底関数を用いるのではなく、数値差分法を用いることで、高エネルギーまで含めたマルチバンドの効果を正確に取り入れることが初めて可能になった。これによって、固体からの高次高調波発生の特徴であるエネルギー上限の特異な電場強度依存性や、スペクトルに見られるマルチプラトーを再現することに成功した。さらに運動量空間でのトラジェクトリを用いた解析に基づき、運動量変化や

バンド間遷移を取り入れた簡単な電子ダイナミクスモデルを提案し、電子の運動量変化を引き起こすパルス光のベクトルポテンシャルの振幅が、ブリュアンゾーン端でのバンド間遷移の有無を左右し、マルチプラトーを生じさせる重要な要素であることを初めて見出した。この結果は 1 次元モデル結晶で得られたものであるが、ここで得られた直感的で単純な描像は、現実の 3 次元結晶での高次高調波発生を理解する上でも有用と考えられる。

さらに第 5 章では、高次高調波発生における電子間相互作用、電子正孔間相互作用の効果を調べるため、初めて TDHF 法によるシミュレーションを行った結果を報告している。時間とともに密度行列が変化する TDHF 法の結果と、密度行列を凍結して TDHF 法の計算を行った、実質的に独立電子近似と等価なシミュレーションによる結果との比較により、高次高調波スペクトルがバンド間分極によって変化し、より弱い電場強度でも高調波発生が起きる効果 (hauling-up effect) のあることが見出された。

以上のように本論文では、固体のレーザー励起による高次高調波発生の数値シミュレーションにより、実験的に知られている特徴を再現し、その物理的描像を明らかにした。得られた知見は当該分野の発展に寄与するものである。なお本論文は指導教員である湯本潤司氏、ならびに佐藤健氏、篠原康氏、石川顕一氏、五神真氏との共同研究の成果を含んでいるが、論文提出者が主体となってシミュレーション手法の開発、計算の実行、および考察を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、審査員全員の一致により、博士 (理学) の学位を授与できると認める。