

修論題目：

単層黒リンにおける高次高調波発生（HHG）の理論的研究 ―モデル構築と実時間ダイナミクス―

氏名：

宮本英雄

概要：

固体における高次高調波発生（HHG）は、強外場下の電子ダイナミクスと物質固有の電子構造を反映する非線形光学現象である。その理論計算では電子自由度を少数のバンドへ切り詰めることが多いが、簡略化が強外場応答に及ぼす影響は対象物質ごとに検証する必要がある。本研究では単層黒リンを対象とし、第一原理計算と Wannier 化に基づいて P 原子の p_x , p_y , p_z 軌道を含む p 軌道モデルを構築した。さらに、バンドギャップ近傍を担う p_z 軌道だけからなる簡略化モデルを構築し、両モデルの線形光学応答と実時間ダイナミクスを同一条件で比較した。 p_z 軌道モデルはギャップ近傍のバンド分散と線形光学応答の主要な特徴を再現し、強外場下でも低エネルギー域の主要な HHG スペクトルは p 軌道モデルとよく一致した。一方、強度が大幅に小さい高エネルギー成分では両モデルの差異が現れ、強外場側では p 軌道モデルのカットオフが p_z 軌道モデルより高次数まで伸びた。以上から、本研究で扱った計算条件の範囲では、単層黒リンの主要な非摂動 HHG 応答をギャップ近傍の電子自由度で記述できる一方、高次数成分、とくにカットオフ次数を定量的に扱うには高エネルギーバンドを含む多軌道モデルが必要であることを示した。