

氏 名

播磨 貴大

学籍番号

1810521

題 目

高強度円偏光レーザーパルス照射による水素分子の解離性イオン化

要 旨

指導教員氏名

森下 亨 教授

[目的]

高強度円偏光レーザーパルスを水素分子に照射することを考える。レーザー照射によって水素分子から電子が1つ離れ、水素分子イオンとなりやがて分子イオンは水素原子と水素イオンに解離する。水素分子イオンが解離するとき電子は2つの原子核のうちのどちらかに局在する。この電子の局在化が電子の放出角と解離エネルギーにどのような依存性を持つかが調べられた [1]。本研究では [1] の結果を再現することを目的とする。

[理論]

水素分子イオンの時間に依存する Schrödinger 方程式は

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, R, t) = \left( -\frac{1}{M} \nabla_R^2 - \frac{1}{2} \nabla_r^2 + V_N(R) + V_e(\mathbf{r}, R) + H_L(t) \right) \Psi(\mathbf{r}, R, t) \quad (1)$$

である。ただし、原子単位系を用いた。また、原子核の質量を  $M$  とした。  $\nabla_r^2$  は電子の位置に対するラプラシアンであり  $\nabla_R^2$  は核間距離  $R$  に対するラプラシアンである。  $V_N(R)$  は原子核同士の Coulomb 相互作用によるポテンシャルエネルギーであり、  $V_e(\mathbf{r}, R)$  は電子と2つの原子核との Coulomb 相互作用によるポテンシャルエネルギーである。また、レーザー場の電子との相互作用を  $H_L(t)$  とした。式(1)を解くために分子イオンの波束  $\Psi(\mathbf{r}, R, t)$  を

$$\Psi(\mathbf{r}, R, t) = \sum_{\mu} \frac{1}{R} \Phi_{\mu}(\mathbf{r}; R) F_{\mu}(R, t) \quad (2)$$

とする。ただし、電子の波動関数  $\Phi_{\mu}(\mathbf{r}; R)$  は、核間距離を固定した方程式  $(-1/2 \nabla_r^2 + V_e(\mathbf{r}, R)) \Phi_{\mu}(\mathbf{r}; R) = U_{\mu}(R) \Phi_{\mu}(\mathbf{r}; R)$  の解である。  $F_{\mu}(R, t)$  は核の波動関数である。  $1s\sigma_g$  状態 ( $\nu = 1$ ) と  $2p\sigma_u$  状態 ( $\nu = 2$ ) の2準位について Born-Oppenheimer 近似の下では、式 (1), (2) を用いて核の波動関数についての波動方程式は以下ようになる。

$$i \frac{\partial}{\partial t} F_{\nu}(R, t) = \left[ -\frac{1}{M} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + V_N(R) + U_{\nu}(R) \right] F_{\nu}(R, t) + \sum_{\mu} d_{\nu\mu}(R) \cdot f(t) F_{\mu}(R, t) \quad (3)$$

円偏光レーザーパルス照射による  $1s\sigma_g$  と  $2p\sigma_u$  間の遷移では、分子軸を  $z$  軸にとると、遷移双極子モーメント  $d_{\nu\mu}(R) = \langle \Phi_{\nu}(\mathbf{r}; R) | z | \Phi_{\mu}(\mathbf{r}; R) \rangle$ 、時間波形  $f(t) = f_0 \cdot \exp[-(2t/\tau)^2] \cos(\omega t)$  と書ける。ここで  $\tau$  はパルス幅、  $\omega$  は角周波数である。式(3)を Split-Operator-Method によって解いた。そして、得られた波動関数をエネルギー  $E$  を持つ水素分子イオンの固有関数  $F'_{E,\nu}(R)$  に射影して

$$A_{\nu}(E) = \langle F_{\nu}(R, t \rightarrow \infty) | F'_{E,\nu}(R) \rangle \quad (4)$$

によって解離エネルギーに依存する遷移振幅  $A_{\nu}(E)$  を求めた。式 (4) より電子が左右の核に局在化する確率を  $P_l(E)$ ,  $P_r(E)$  として  $P_l(E) = |A_1(E) + A_2(E)|^2/2$ ,  $P_r(E) = |A_1(E) - A_2(E)|^2/2$  によって求め、以下で定義する電子の局在パラメータ  $\beta$  を求めた。

$$\beta = \frac{P_l(E) - P_r(E)}{P_l(E) + P_r(E)} \quad (5)$$

円偏光レーザーパルスの場合、イオン化における電子の放出角はレーザーの位相に依存する。これを利用して、電子の放出角と局在パラメータの関係を調べた。

[結果]

局在パラメータの解離エネルギーと電子の放出角に関する依存性が [1] の結果をおおよそ再現することを確かめた。

[参考文献]

[1] J. Wu, M. Magrakvelidze, L.P.H. Schmidt, M.Kunitski, T. Pfeifer, M. Schöfer, M.Pitzer, M. Richer, S. Voss, H.Sann, H.Kim, J.Lower, Y.jahnke, A.Czasch, U.Thumm & R. Dörner, "Understanding the role of phase in chemical bond breaking with coincidence angular streaking", Nat. Commun. 4, 2177 (2013)