

令和4年度 修士論文発表

「二色直線偏光高強度レーザー照射による
光電子の焦線の計算」

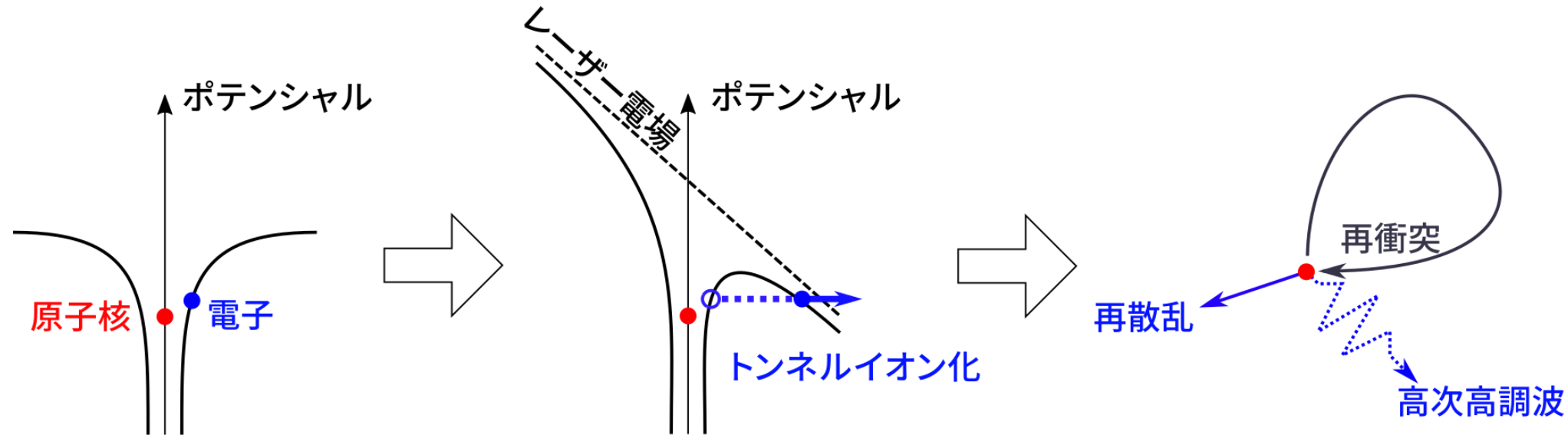
森下研究室 濱川悠真

- 高強度レーザー場中で電子はトンネルイオン化 → 一定条件下で再散乱
- レーザーの半サイクル中に生じる2つの再散乱軌道が一致するような焦線
- 単色直線偏光及び二色直線偏光について焦線を計算
- 電場パラメータを変化させた時の最大最終運動量の変化を調べた
- 複数の焦線が1つに重なるような電場パラメータを決定した
- 単色直線偏光について光電子運動量分布を計算した

序論…背景:高強度レーザーとトンネルイオン化

- 高強度レーザー($10^{14}\text{W}/\text{cm}^2$ 程度): 電子-核間のクーロン力より強い
- ポテンシャルが歪みトンネルイオン化 → 古典力学的運動～再衝突

→3ステップモデル



序論…背景:高強度レーザーとトンネルイオン化

- 最終状態に至るまでの電子の運動を再現
 - 観測データから遡ってイオン化時の状態を推測できる
 - 再散乱電子を利用し物質の構造を把握する研究への応用

• なぜトンネルイオン化?なぜ再散乱電子?

- レーザー電場の位相に依存して電子の運動が変化
- 周期(10^{-15} s)より小さいアト秒オーダーの時間分解能

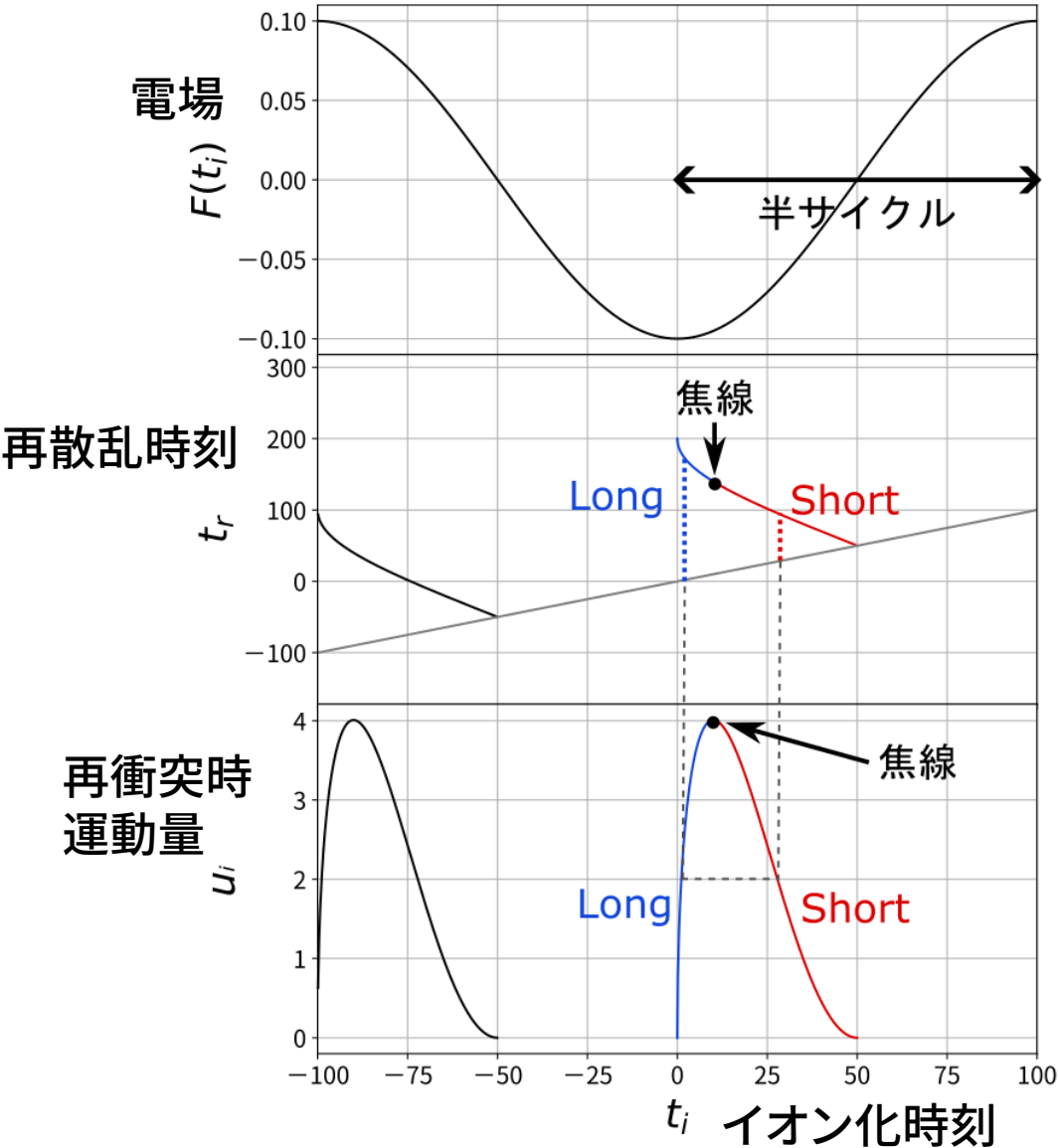
• 実験で得られるデータを理論計算で再現するメリットは？

→レーザーを用いた実験のコスト問題

→計算を用いた結果の予測・得たい結果に適したパラメータの決定

→限られたリソースを無駄にせず有効活用できる

序論…焦線とは



再衝突時の運動量はイオン化時刻により変化

→同じ運動量になる古典軌道が2つ存在

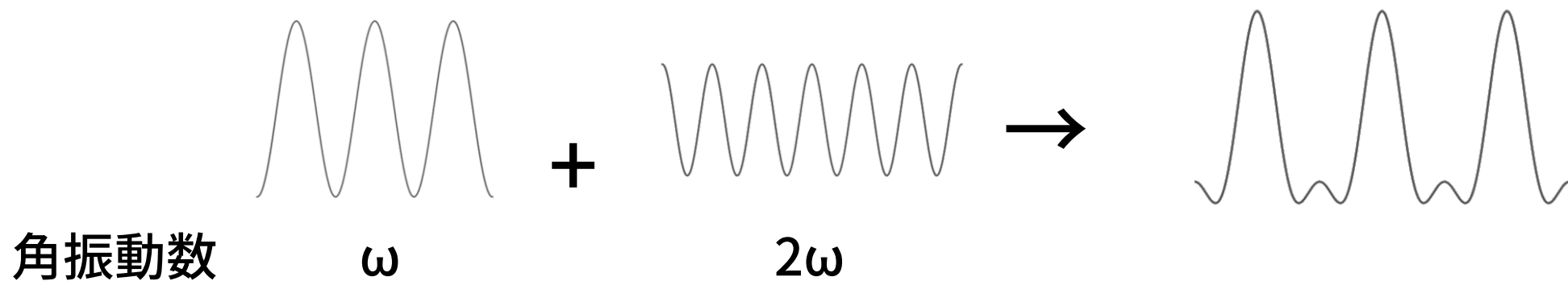
→2つの軌道が重なる点: **焦線**

焦線では再衝突時運動量・**最終運動量**が極大

→**光電子運動量分布**の計算に利用

序論…二色偏光

- 先行研究では単色直線/円偏光 → 本研究では**二色直線偏光**で計算
→ 角振動数の異なる2つの電場を合成



- 二色偏光の場合最終運動量の極大値が複数 → 焦線も複数存在
- 焦線が1つに重なるような電場パラメータを求めたい

- イオン化で放出された電子は電場のから力を受け運動

- 原子核-電子間のクーロン力は電場に比べ小さいため無視

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{v}} = -\mathbf{F} \\ \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} \end{cases} \quad (\text{原子単位系})$$

- イオン化時刻 t_i , 再散乱時刻 t_r における運動量 $\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_r$ は

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{v}(t_i) - \frac{1}{t_r - t_i} [\mathbf{r}(t_r) - \mathbf{r}(t_i)]$$

$$\mathbf{u}_r = \mathbf{v}(t_r) - \frac{1}{t_r - t_i} [\mathbf{r}(t_r) - \mathbf{r}(t_i)]$$

理論…運動量と再散乱条件

- イオン化時刻において電場方向の単位ベクトルを \mathbf{e}_i とすれば

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_i = 0$$

よって

$$e_x \left[- \int_{t_g}^{t_i} F_x(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \int_{t_i}^{t_r} \int_{t_g}^{t'} F_x(t'') dt'' dt' \right] + e_y \left[- \int_{t_g}^{t_i} F_y(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \int_{t_i}^{t_r} \int_{t_g}^{t'} F_y(t'') dt'' dt' \right] = 0 \quad (\text{再散乱条件式})$$

式の値は基準時刻 t_g によらず, (t_i, t_r) の組によって決まる

理論…最終運動量最大条件

- 散乱角 θ , 再散乱直後の運動量 \mathbf{u}'_f を用いると最終運動量は

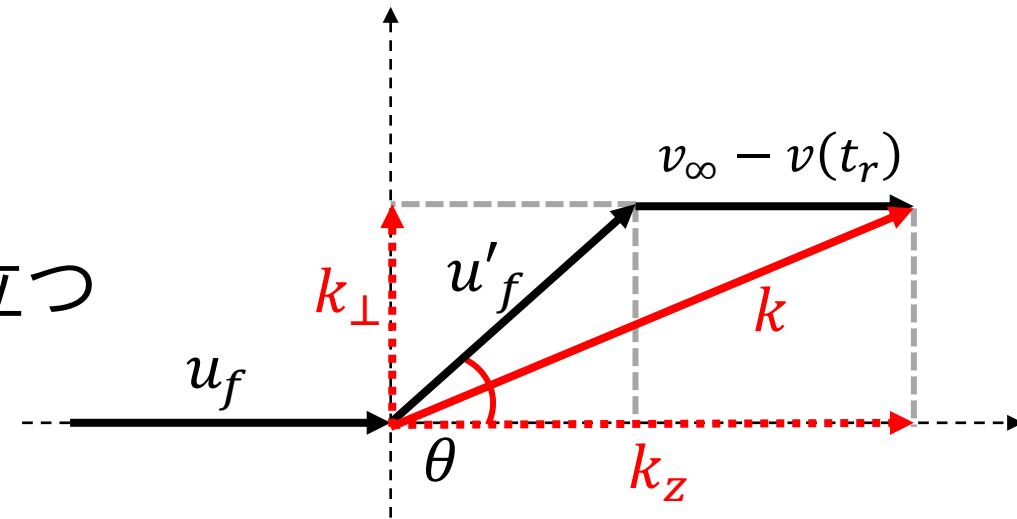
$$\mathbf{k} = \mathbf{u}'_f + [v_\infty - v(t_r)]\mathbf{e}_z$$

$$\rightarrow \mathbf{u}'_f(t_r, \mathbf{k}) = \mathbf{k} - [v_\infty - v(t_r)]\mathbf{e}_z$$

弾性散乱の場合エネルギー保存則が成り立つ

$$\frac{1}{2}u_f^2(t_i, t_r) = \frac{1}{2}u'^2_f(t_r, \mathbf{k})$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial t_r} u_f^2(t_i, t_r) - \frac{\partial}{\partial t_r} u'^2_f(t_r, \mathbf{k}) = 0$$



理論…最終運動量最大条件

$$u_f \frac{\partial}{\partial t_r} \left[\mathbf{v}(t_r) - \frac{\mathbf{r}(t_r) - \mathbf{r}(t_i)}{t_r - t_i} \right] - u'_f \frac{\partial}{\partial t_r} \{ \mathbf{k} - [v_\infty - v(t_r)] \mathbf{e}_z \} = 0$$

$$u_f \left[-F_x(t_r) \mathbf{e}_z - \frac{u_f}{t_r - t_i} \right] - u'_f \left\{ \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t_r} - F_x(t_r) \mathbf{e}_z \right\} = 0$$

$$[u'_f - u_f] F_x(t_r) \mathbf{e}_z - \frac{u_f^2}{t_r - t_i} = u'_f \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t_r}$$

$$[\cos(\theta) - 1] F_x(t_r) \mathbf{e}_z - \frac{u_f}{t_r - t_i} = \cos(\theta) \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t_r}$$

焦線における最終運動量は極値をとる $\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t_r} = 0$

$F_y = 0$ の場合, 焦線の条件式は

$$G(t_i, t_r, \theta) = [\cos(\theta) - 1] F_x(t_r) - \frac{u_r(t_i, t_r)}{t_r - t_i}$$

θ を変化させこの条件を満たす (t_i, t_r) から \mathbf{k} を求めると焦線が得られる

理論…最終運動量最大条件

光電子運動量分布は微分散乱断面積と再散乱電子波束の積で表される

(水素原子の場合)

$$P_c(\mathbf{k}) = |f(\mathbf{u}_f, \Omega)|^2 W(\theta, \Delta k)$$

微分散乱断面積 $|f(\mathbf{u}_f, \Omega)|^2 = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{1}{2\pi \frac{1836}{1837} u_f^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$

再散乱電子波束 $W(\theta, \Delta k) = |\text{Ai}(\alpha(\theta)[\Delta k - q(\theta)])|^2 \left|\frac{2}{S_r'''(\theta)}\right|^{\frac{2}{3}} \frac{4\pi^2 |A_0(t_i)|^2}{(t_r - t_i)^3 |F(t_i)|} \exp\left[-\int_{-\infty}^{t_i} \Gamma_0(t) dt\right]$

$$q(\theta) = \frac{-E_0(t_i)}{(t_r - t_i) |F(t_i)|}$$

$$\alpha(\theta) = \left(\frac{2}{S_r'''(\theta)}\right)^{\frac{1}{3}} |u_f|$$

$$S_r'''(\theta) = u_f \left[2\dot{F}(t_r) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \frac{3F(t_r)}{t_r - t_i} - \frac{3u_f}{(t_r - t_i)^2} - \frac{u_f^2}{(t_r - t_i)^3 F(t_i)} \right]$$

$$|A_0(t)|^2 = \frac{4\pi\sqrt{2|E_0|}\Gamma_0(t)}{|F(t)|}$$

$$E_0(t) = \mathcal{E}_0(t) - \frac{i}{2}\Gamma_0(t) \quad \dots \text{エネルギー固有値}$$

$$\mathcal{E}_0 = -0.485483 \text{ a.u.} \quad \dots \text{水素原子のイオン化エネルギー}$$

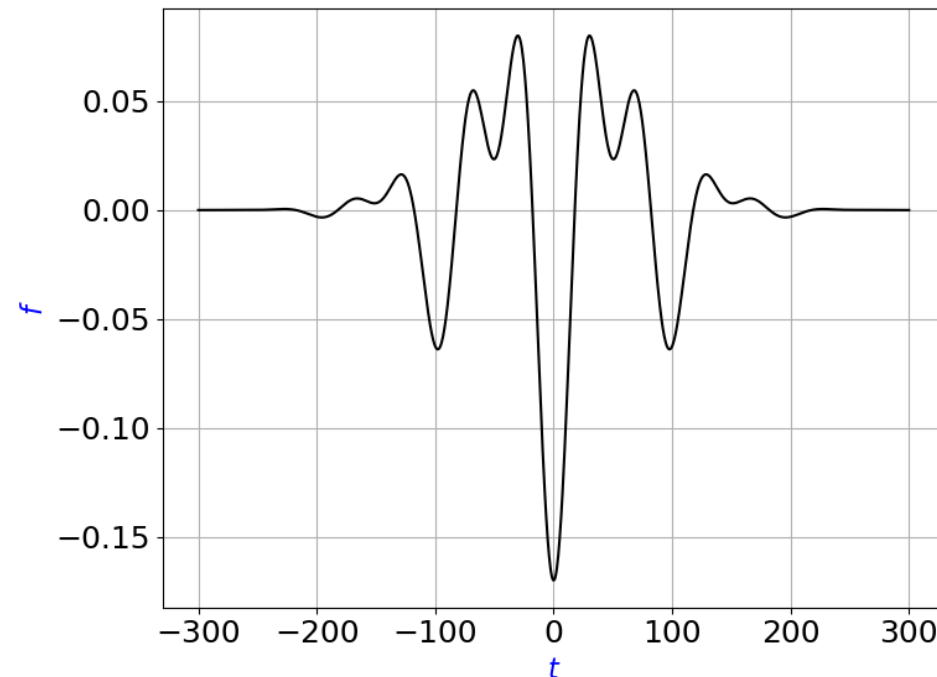
$$\Gamma_0(t) = \frac{4}{F(t)} \exp\left(-\frac{2}{3F(t)}\right) \quad \dots \text{水素原子のイオン化レート}$$

方法:用いたレーザー電場

- 計算に用いた電場…2サイクルの直線偏光電場(ガウシアンエンベロープ)

$$F(t) = -F_0 \left[\cos\left(\frac{4\pi t}{T}\right) + r \cos\left(\frac{8\pi t}{T} + \delta\right) \right] \exp\left[-\left(\frac{2t}{T}\right)^2\right]$$

振幅 F_0 , 周期 T , 振幅比 r ($r = 0$ で単色直線偏光), 位相差 δ ,



$$F_0 = 0.1, T = 200, r = 0.5, \delta = 0.0$$

方法:計算手法

- 数値積分…ニュートンコーツの公式(シンプソン則)

$$\int_a^b f(t') dt' = \sum_{k=1}^{\frac{a-b}{h}} \int_{a+h(k-1)}^{a+hk} f(t') dt' = \sum_{k=1}^{\frac{a-b}{h}} \frac{f(a+h(k-1)) + 4f(a+h(k-\frac{1}{2})) + f(a+hk)}{6} h$$

- 数値微分…差分法

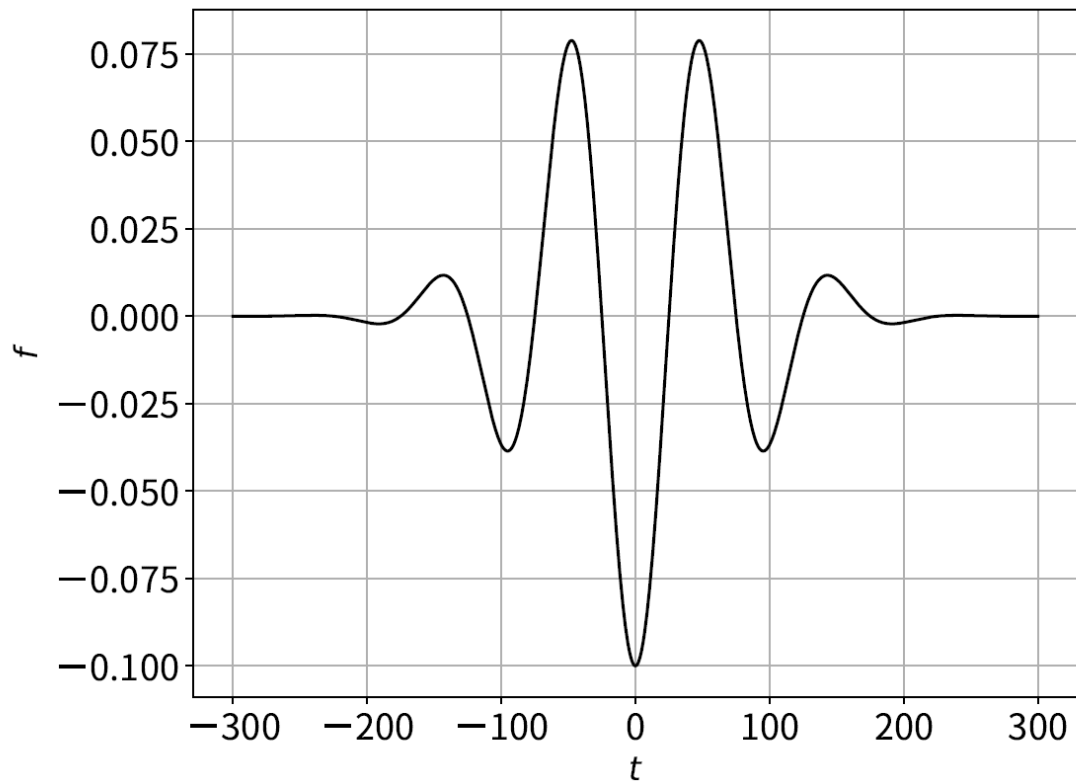
$$f'(t) = \frac{f(t-2.5h) - 9f(t-1.5h) + 45f(t-0.5h) + 45f(t+0.5h) + 9f(t+1.5h) - f(t+2.5h)}{60h} + O(h^6)$$

- 条件式の求解…二分法

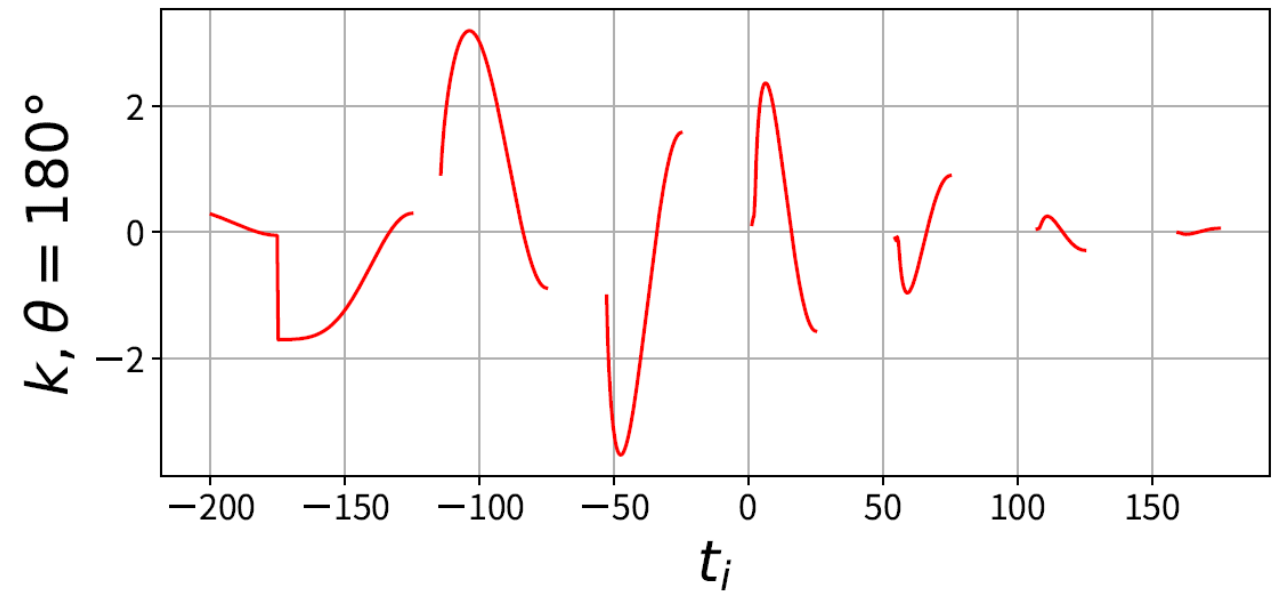
課題1 焦線の計算 単色直線偏光の場合

$$F(t) = -0.1 \cos\left(\frac{4\pi}{200}t\right) \left[-\left(\frac{2t}{200}\right)^2\right] \quad (F_0 = 0.1, T = 200, r = 0, \delta = 0)$$

電場の時間変化



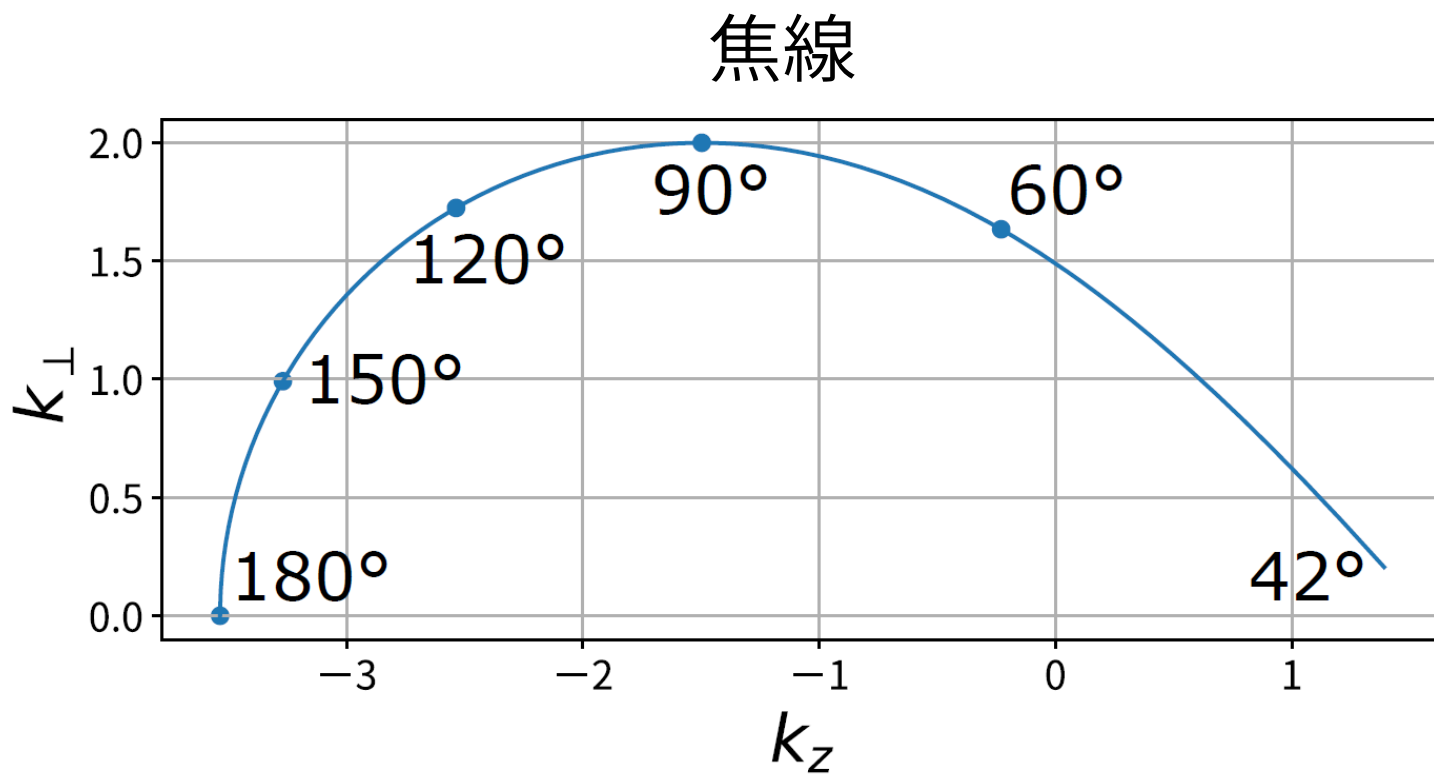
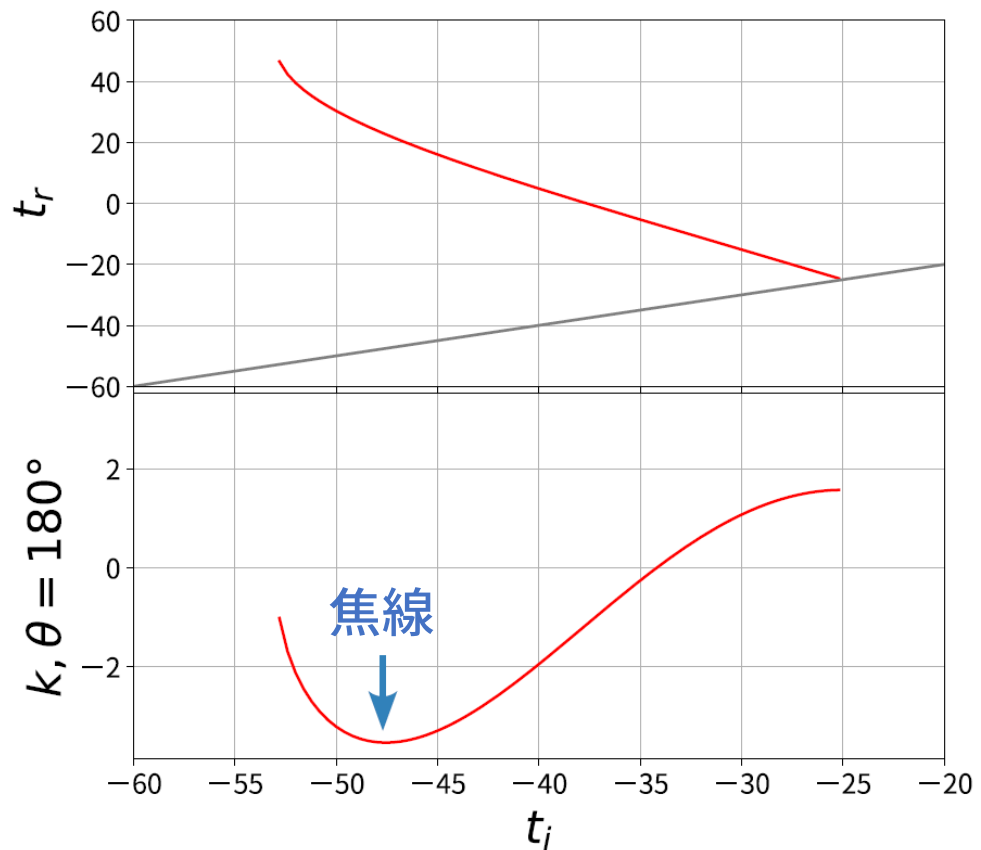
イオン化時刻に対する最終運動量



課題1 焦線の計算 単色直線偏光の場合

$$F(t) = -0.1 \cos\left(\frac{4\pi}{200}t\right) \left[-\left(\frac{2t}{200}\right)^2\right] \quad (F_0 = 0.1, T = 200, r = 0, \delta = 0)$$

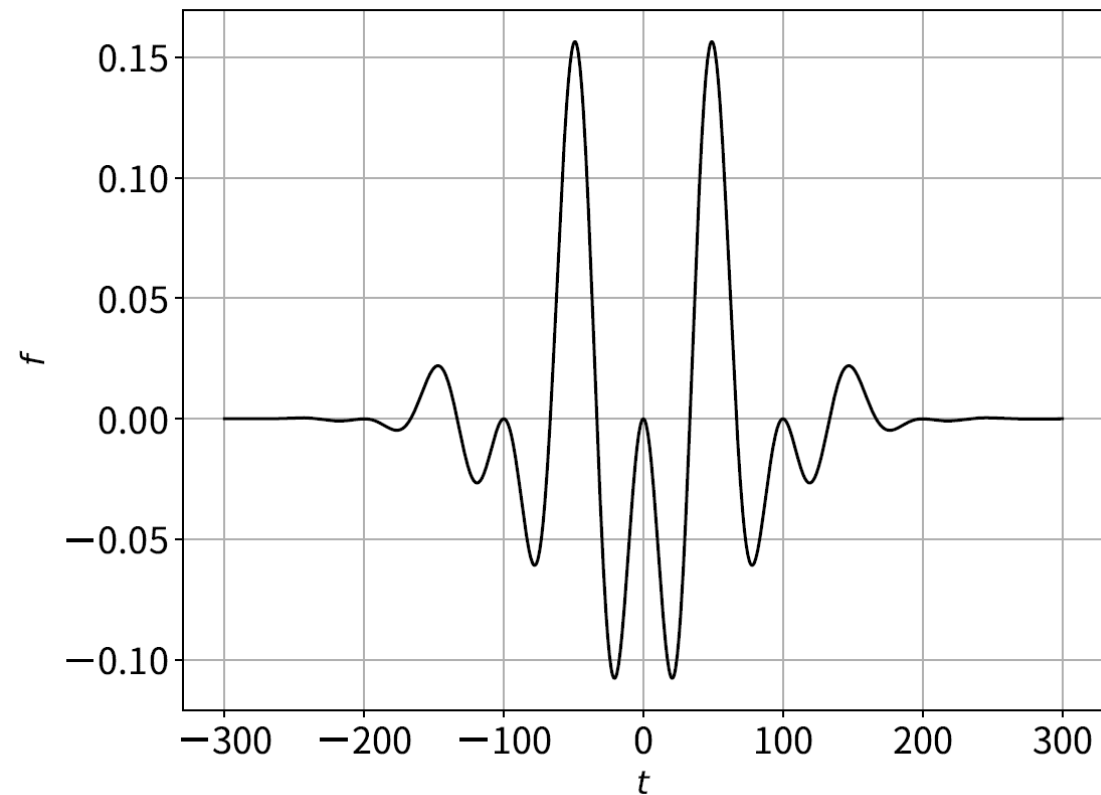
イオン化時刻に対する再散乱時刻・最終運動量



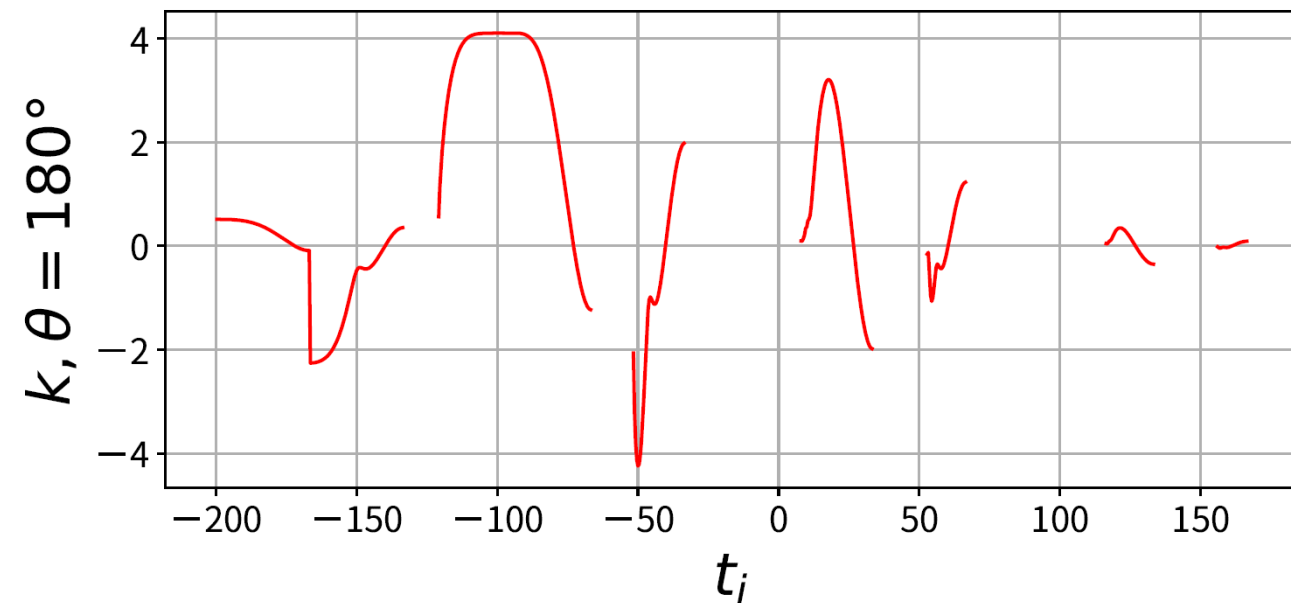
課題1 焦線の計算 二色直線偏光の場合

$$F(t) = -0.1 \left[\cos\left(\frac{4\pi}{200}t\right) + 0.9\cos\left(\frac{8\pi}{200}t + \pi\right) \right] \left[-\left(\frac{2t}{200}\right)^2 \right] \quad (F_0 = 0.1, T = 200, r = 0.9, \delta = \pi)$$

電場の時間変化



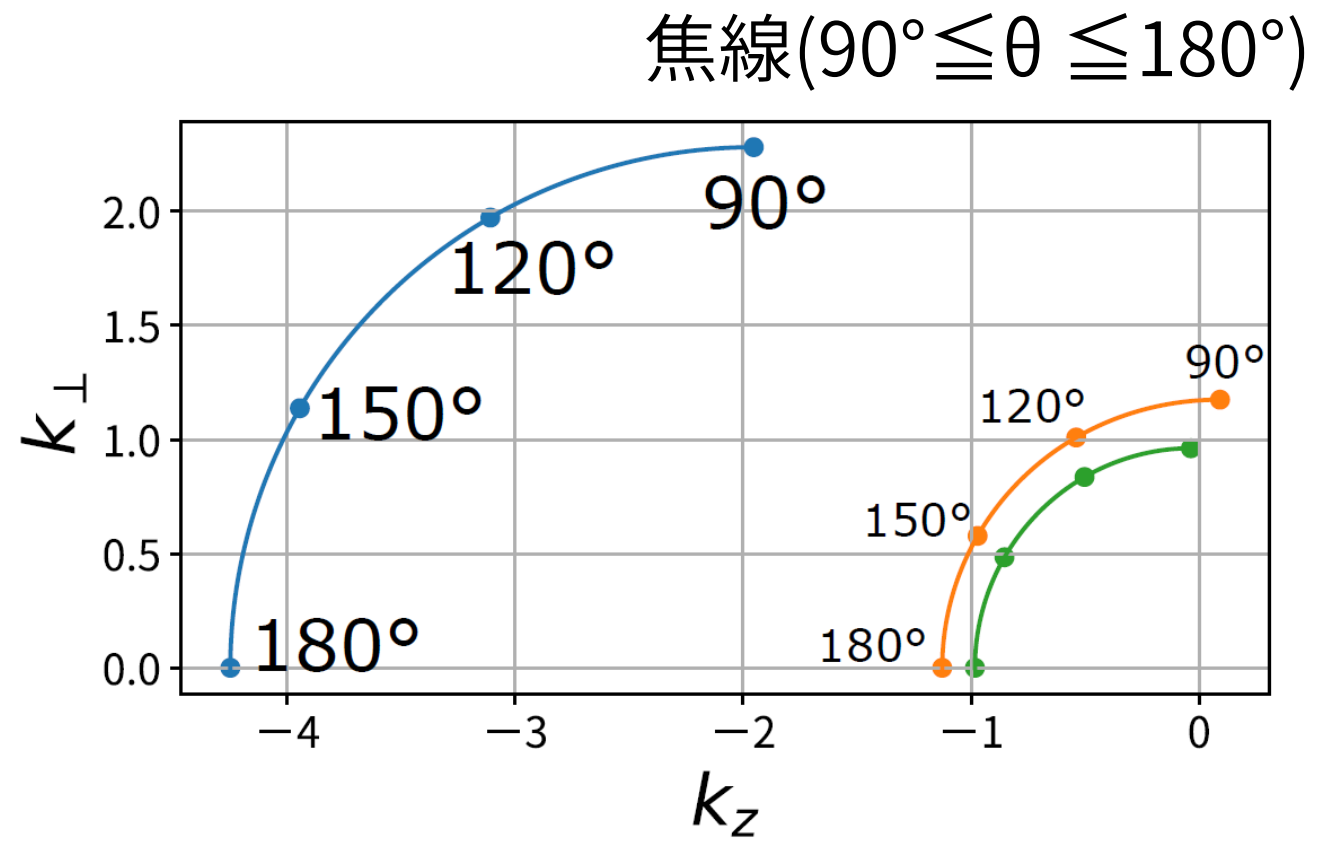
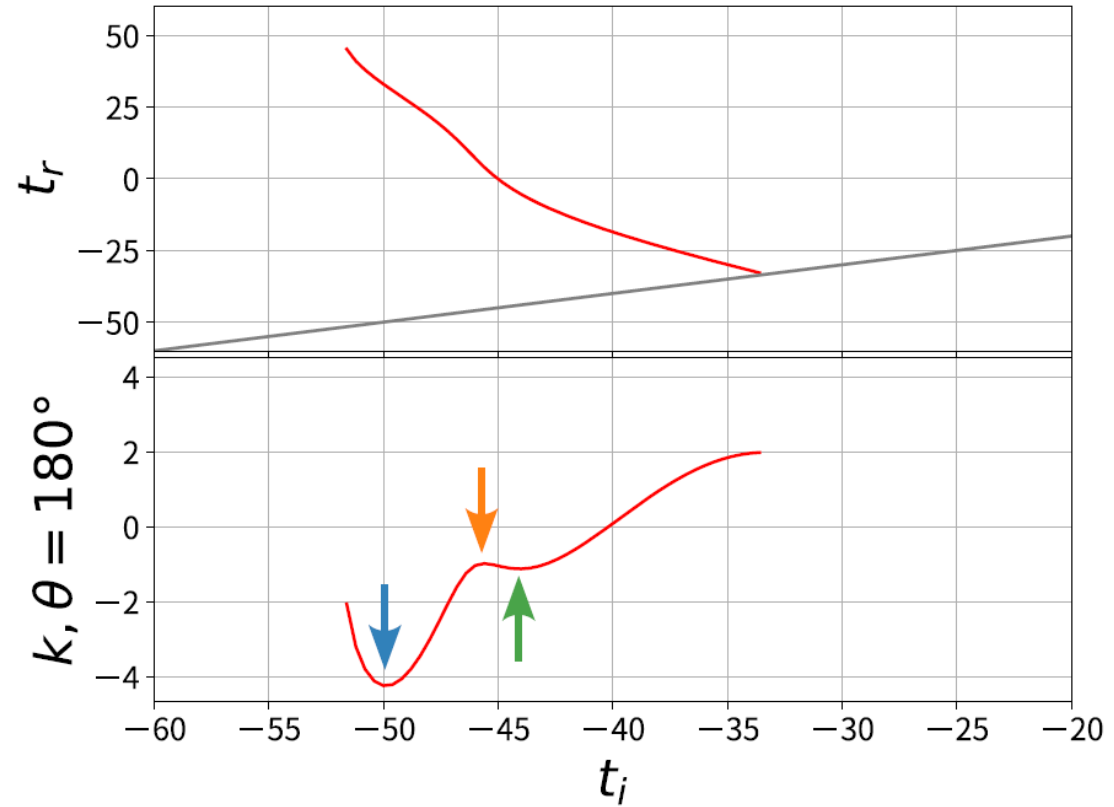
イオン化時刻に対する最終運動量



課題1 焦線の計算 二色直線偏光の場合

$$F(t) = -0.1 \left[\cos\left(\frac{4\pi}{200}t\right) + 0.9\cos\left(\frac{8\pi}{200}t + \pi\right) \right] \left[-\left(\frac{2t}{200}\right)^2 \right] \quad (F_0 = 0.1, T = 200, r = 0.9, \delta = \pi)$$

イオン化時刻に対する再散乱時刻・最終運動量



課題2 二色偏光電場パラメータと焦線の関係

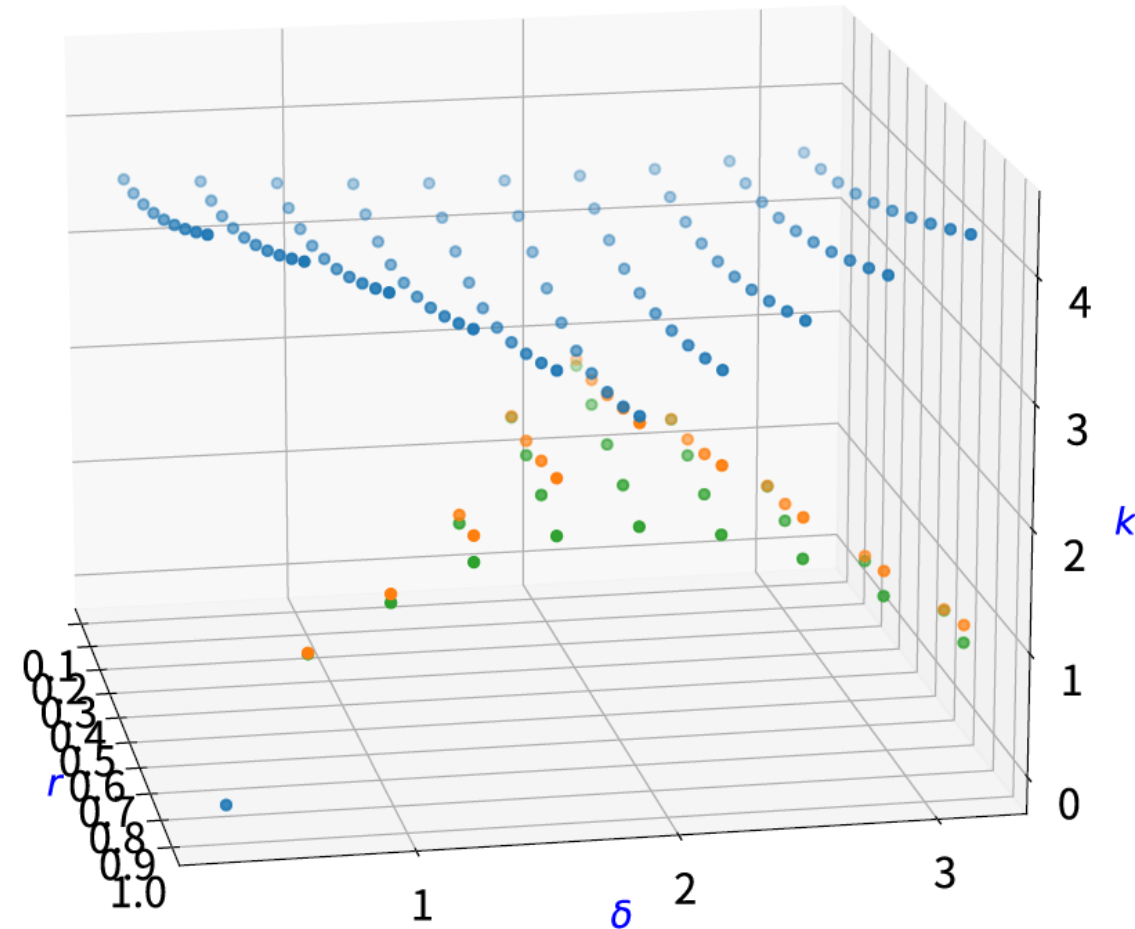
$$F(t) = -0.1 \left[\cos\left(\frac{4\pi}{200}t\right) + r \cos\left(\frac{8\pi}{200}t + \delta\right) \right] \left[-\left(\frac{2t}{200}\right)^2 \right] \quad (F_0 = 0.1, T = 200)$$

r, δ を変化させた時の最大最終運動量の分布を調べる

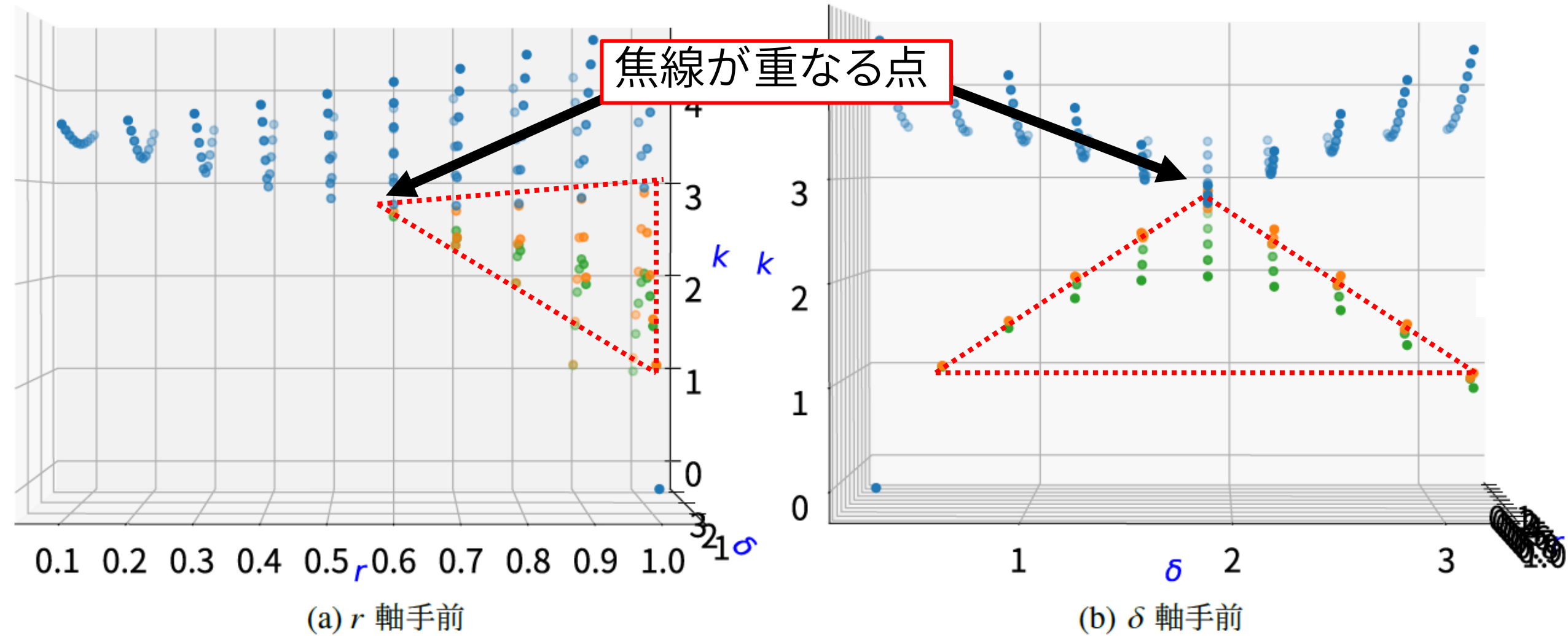
青・橙・緑点は最終運動量の極値

複数の極値を持つ→焦線が複数存在

3点が1箇所に収束する r, δ → 焦線が重なる点



課題2 二色偏光電場パラメータと焦線の関係



r, δ の範囲を狭めながら計算を繰り返し焦線が重なる点を決定→ $(r, \delta) = (0.4710, 1.8180)$

課題2 二色偏光電場パラメータと焦線の関係

r, δ の範囲を狭めながら計算を繰り返し焦線が重なる点を決定

$$\rightarrow (r, \delta) = (0.4748, 1.825)$$

この点での $\theta=180^\circ$ の時の最終運動量は-2.834357, -2.834315, -2.834313
(小数点以下4桁まで一致)

課題3 光電子運動量分布の計算

単色直線偏光

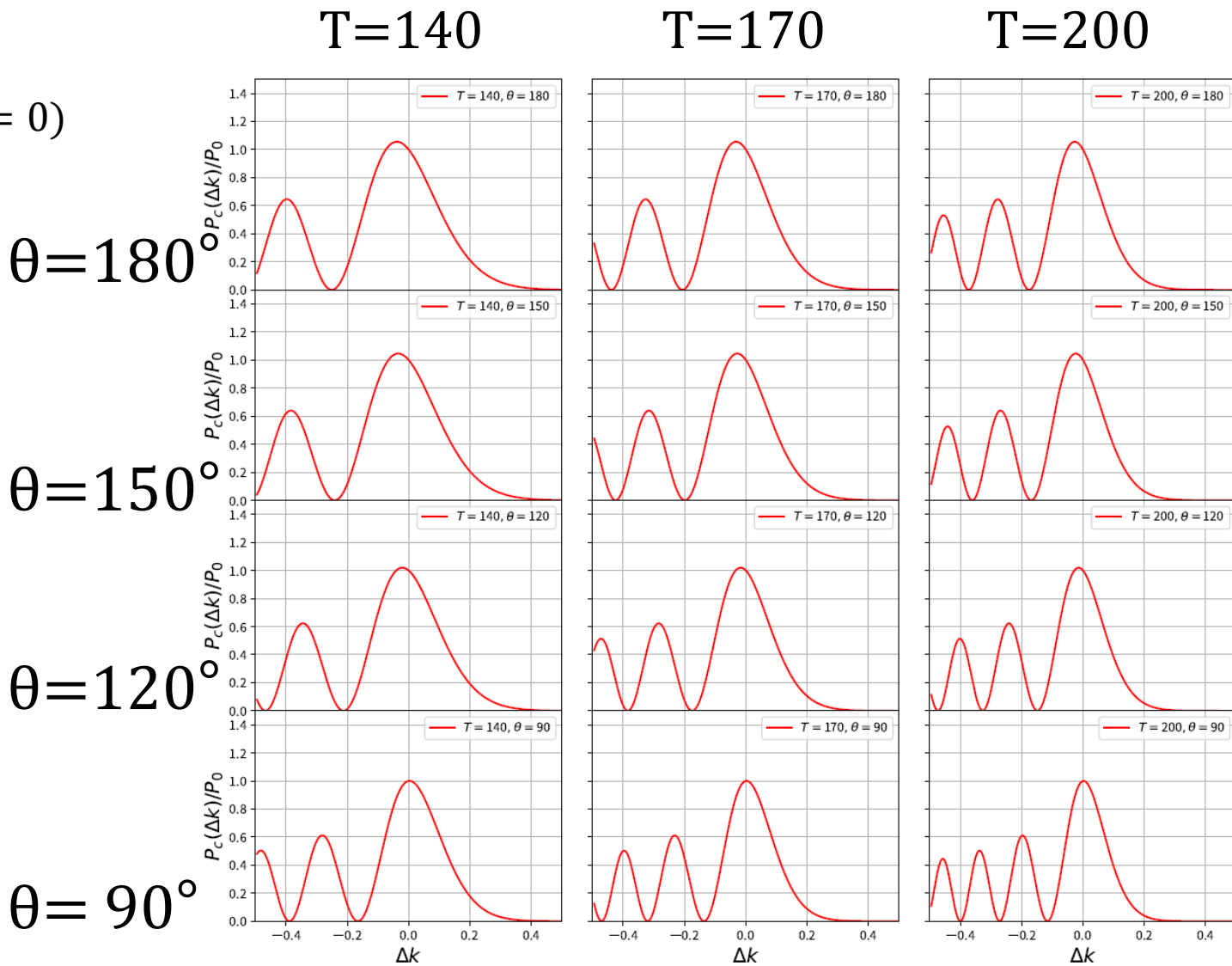
$$F(t) = -0.1 \cos\left(\frac{4\pi}{T}t\right) \left[-\left(\frac{2t}{T}\right)^2\right] \quad (F_0 = 0.1, r = 0, \delta = 0)$$

θ, T を変化させ光電子運動量分布を計算

$$P_c(\mathbf{k}) = |f(\mathbf{u}_f, \Omega)|^2 W(\theta, \Delta k)$$

$$|f(\mathbf{u}_f, \Omega)|^2 = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{1}{2\pi \frac{1836}{1837} u_f^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

$$W(\theta, \Delta k) = |\text{Ai}(\alpha(\theta)[\Delta k - q(\theta)])|^2 \left|\frac{2}{S_r'''(\theta)}\right|^{\frac{2}{3}} \frac{4\pi^2 |A_0(t_i)|^2}{(t_r - t_i)^3 |F(t_i)|} \exp\left[-\int_{-\infty}^{t_i} \Gamma_0(t) dt\right]$$



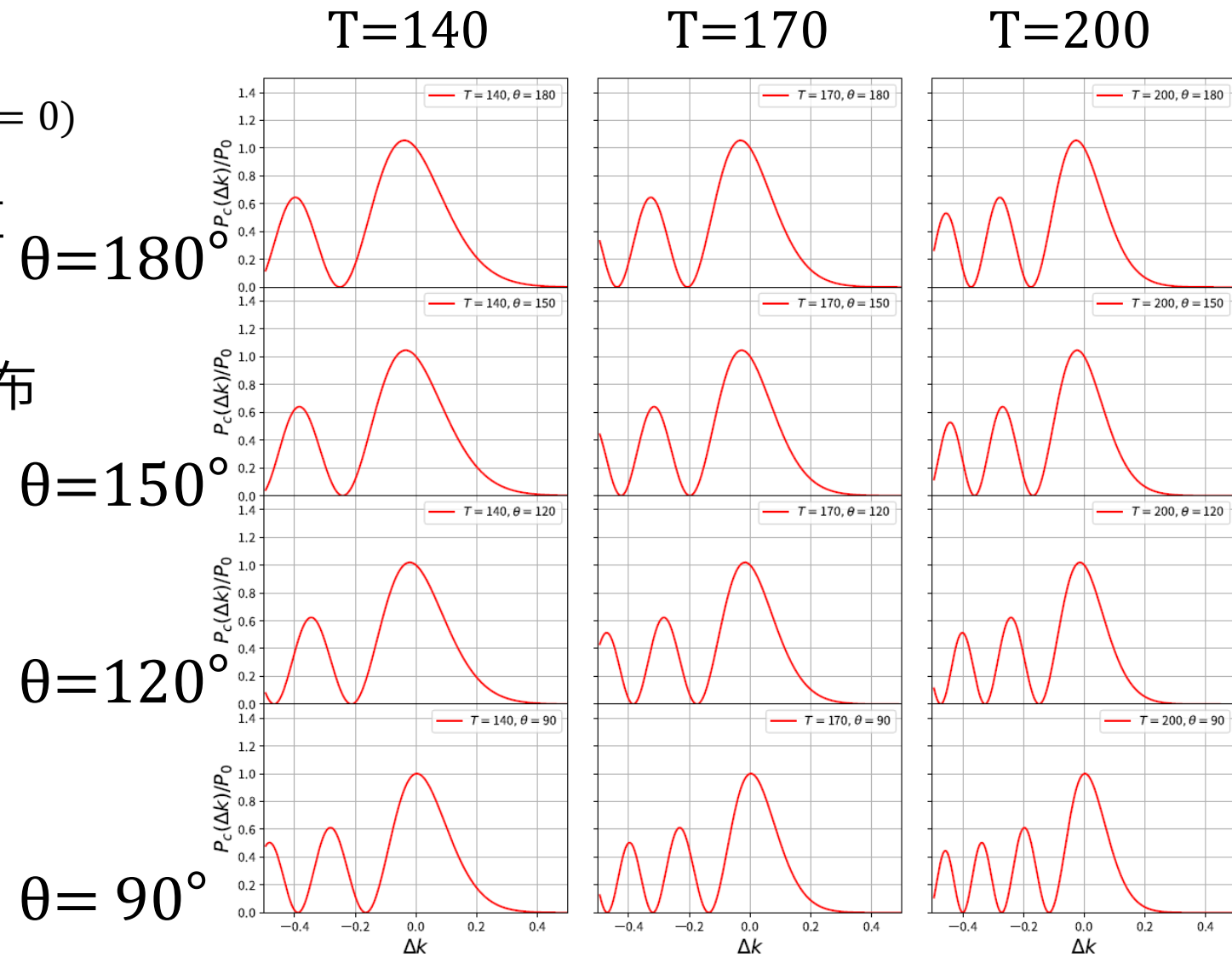
課題3 光電子運動量分布の計算

単色直線偏光

$$F(t) = -0.1 \cos\left(\frac{4\pi}{T}t\right) \left[-\left(\frac{2t}{T}\right)^2\right] \quad (F_0 = 0.1, r = 0, \delta = 0)$$

θ, T を変化させ光電子運動量分布を計算

- Δk が負の領域で振動 → 同心円状の分布
- T が大きくなると振動周期が小さくなる
- θ が小さくなると振動周期が小さくなる



課題3 光電子運動量分布の計算

単色直線偏光

$$F(t) = -0.2 \cos\left(\frac{4\pi}{T}t\right) \left[-\left(\frac{2t}{T}\right)^2 \right] \quad (F_0 = 0.1, r = 0, \delta = 0)$$

θ, T を変化させ光電子運動量分布を計算

$\theta = 180^\circ$

$\theta = 150^\circ$

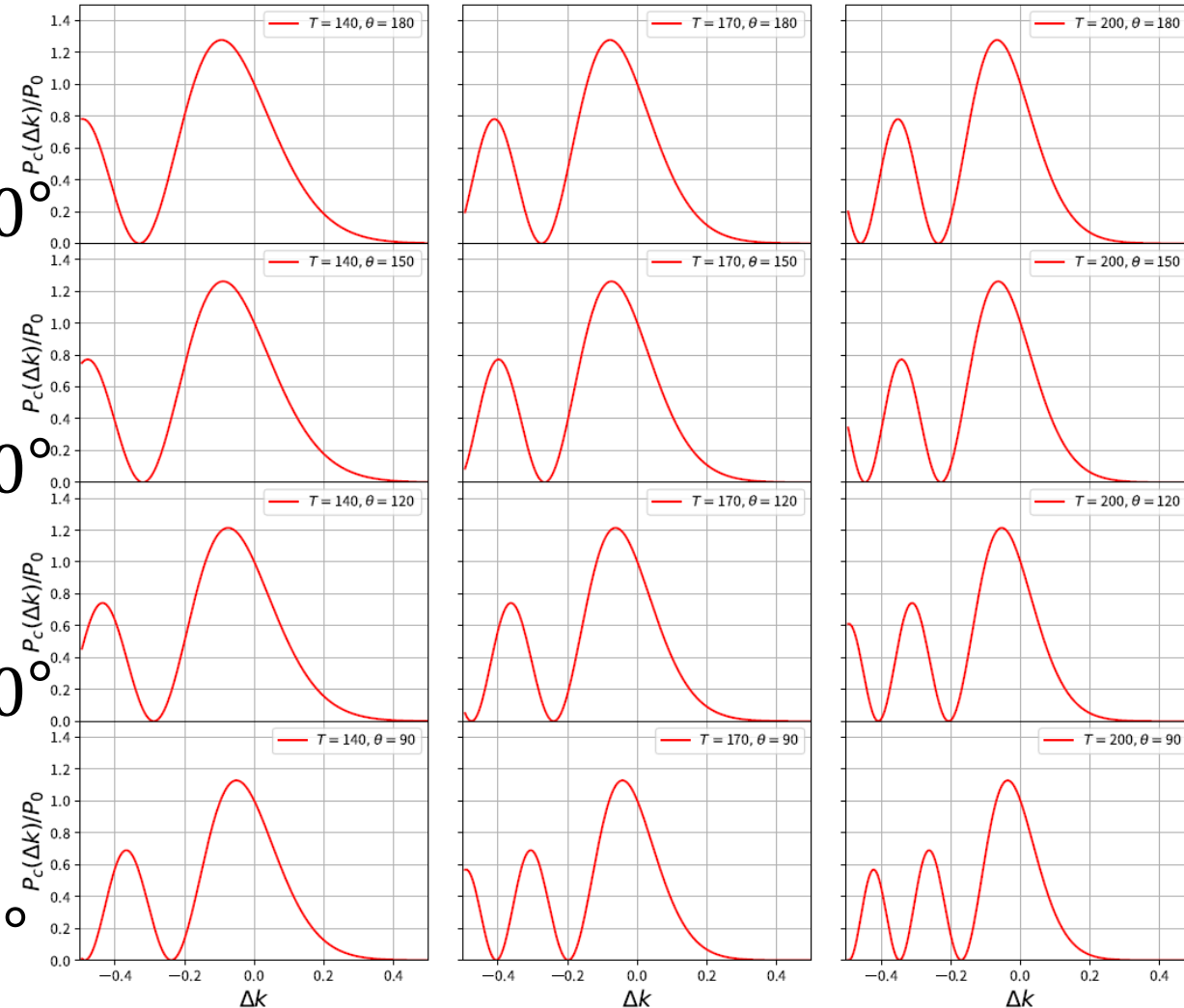
$\theta = 120^\circ$

$\theta = 90^\circ$

T=140

T=170

T=200



先行研究の結果をよく再現

→ 焦線・光電子運動量分布の計算が
正しく行われていることを確認

- 高強度レーザー照射によるトンネルイオン化～再散乱の過程について電子の最終運動量及び**焦線**を求めた
→単色直線偏光, **二色直線偏光**電場で計算
- 二色偏光の電場パラメータを変化させた時の焦線の変化を調べた
→振幅比・位相差を変化させ**焦線が1つに重なる点**をグラフから決定
- 単色直線偏光について**光電子運動量分布**を計算した

- Morishita, Toru, and Oleg I. Tolstikhin. "Adiabatic theory of strong-field photoelectron momentum distributions near a backward rescattering caustic." *Physical Review A* 96.5 (2017): 053416.
- Mizuno, Tomoya, et al. "Observation of the quantum shift of a backward rescattering caustic by carrier-envelope phase mapping." *Physical Review A* 103.4 (2021): 043121.
- Hoang, Van-Hung, et al. "Retrieval of target structure information from laser-induced photoelectrons by few-cycle bicircular laser fields." *Physical Review A* 95.3 (2017): 031402.
- Raz, Oren, et al. "Spectral caustics in attosecond science." *Nature Photonics* 6.3 (2012): 170-173.

参考文献

- 濱川 悠真, 高強度レーザー場中の電子の古典軌道と再散乱条件, 令和2年度 電気通信大学 卒業論文, 2021
- 渡邊吉晃, 高強度楕円偏光レーザー場によるトンネルイオン化電子の再散乱過程, 令和元年度 電気通信大学 卒業論文, 2020
- 松井大和, 多電子・分極・スペクテータ・核運動の効果を取り入れた水素分子トンネルイオン化の弱電場漸近理論, 2022
- 大森賢治(著, 編集), 石井順久(著), 石川顕一(著), 板谷治郎(著), 香月浩之(著), 森下亨(著), 渡部俊太郎(著), 「アト秒科学: 1京分の1秒スケールの超高速現象を光で観測・制御する」
- 牛島 省(著), 「数値計算のためのFortran90/95 プログラミング入門」
- 久保田光一(著), 「工学基礎 数値解析とその応用」

令和4年度 修士論文発表

「二色直線偏光高強度レーザー照射による
光電子の焦線の計算」

森下研究室 濱川悠真