

氏 名

齋藤祐大

学籍番号

1910277

題 目

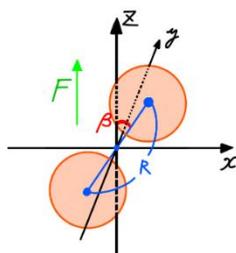
一様静電場中における水素分子イオンのシーガート状態：
分子軸が電場ベクトルと平行でない場合の複素エネルギーの
核間距離依存性の計算

要 旨

指導教員氏名

森下亨

近年レーザー技術の発展から原子・分子に対し高強度レーザーを照射することで反応を調べる実験が可能になった。高強度レーザーを照射することで起きる分子の反応の1つにトンネルイオン化がある。トンネルイオン化とは、原子や分子に対して外部強電場を与えた際に、原子核とクーロンポテンシャルが歪められることでできるエネルギー障壁を電子が透過していくことでイオン化することである。トンネルイオン化過程において正則かつ外向き波境界条件での固有状態をシーガート状態と呼び、シーガート状態での時間に依存しないシュレディンガー方程式が複素数を含む固有解を持つ。先行研究[1]では水素分子イオン H_2^+ について電場の向きと分子軸が平行であるとき、円筒対称性を考慮したプログラムを用いて核間距離 R を変えて計算が行われた。また、先行研究[2]では平衡核間距離のとき、円筒対称性



がない一般的な配向角を扱うプログラムを用いて電場の向きと分子軸の配向角 β を変えて複素エネルギーの計算が行われた(図1)。本研究ではこれまで行われていないもののうち、電場の向きと分子軸が平行でない場合についての水素分子イオンの強電場中の複素エネルギーを、一般的な配向角を扱うプログラムを用いて核間距離 R を変えて計算した。電場の向きと分子軸が平行でない場合、水素分子は円筒対称性を持たないので平行な場合と比べて計算量が多い。また核間距離が大きくなると計算が安定でなくなるため注意して計算を実行した。

図1. H_2^+ に対する核間距離 R と配向角 β

H_2^+ は陽子2つに電子1つで構成される最も基本的な二原子分子であり、電場 $\mathbf{F} = F_z$ でのシュレディンガー方程式はポテンシャルを $V(\mathbf{r})$ として原子単位系(a. u.)下で

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + Fz - E\right]\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (1)$$

と示され、これを放物座標系で表し、断熱ポテンシャルと外向き波境界条件から固有解が最終的に

$$E = \varepsilon - \frac{i}{2}\Gamma \quad (2)$$

として導かれる。式(2)における ε, Γ はそれぞれエネルギーとトンネルイオン化レートを示し、本研究で $V(\mathbf{r})$ はソフトクーロンポテンシャルを用いた。

本研究では平行に近い配向角 $\beta = 2^\circ$ として一般的な配向角を扱うプログラムを用いて計算を行い、円筒対称性を考慮したプログラムによる先行研究[1]の $\beta = 0^\circ$ の結果と比較した。核間距離 $R(\text{a. u.}) = 2, 3, 4, 5, 6, 7$ 、外部強静電場成分の大きさ $F(\text{a. u.}) = 0.000 \sim 0.110$ (0.005刻み)の範囲で電場の大きさと ε, Γ それぞれの依存性と、核間距離と ε, Γ それぞれの依存性の2つについての計算結果を得た。 β の条件と R, F それぞれの範囲が近いことから先行研究[1]の結果と比べてグラフの概形はよく似たものが得られた。一般的な配向角を扱うプログラムが円筒対称性を考慮したプログラムと同様に大きな核間距離に対しても扱うことができることを確かめた。

[1] 水越アレックス春彦, 強電場中の水素分子イオンの複素エネルギー準位, 2013年度卒業論文.

[2] Linda Hamonou,1 Toru Morishita,1 and Oleg I. Tolstikhin, Molecular Siegert states in an electric field, Phys. Rev. A 86, 013412 (2012).

