

# 令和4年度 卒業論文

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

Ⅲ類・化学生命工学プログラム

1910277 齋藤祐大

指導教員 森下亨

令和5年 2月 1日

# 目次

1. 序論	3
2. 理論	4
2-1. トンネルイオン化 .....	4
2-2. $H_2^+$ のシュレディンガー方程式 .....	4
2-3. シーガート法 .....	5
3. 計算結果	10
4. 結論	18
謝辞	19
参考文献	19

# 1. 序論

近年では原子・分子に対し高強度レーザーを用いることで外部強電場成分を与えた研究が実験的・理論的にも可能になり、多くの研究が行われている。その研究テーマの一つに水素分子イオン( $H_2^+$ )のトンネルイオン化がある。先行研究[1]では外部強静電場による原子・分子のトンネルイオン化をシーガート法と呼ばれる固有値問題の解析法にその固有解 Siegert States(SSs)となる複素数を含むエネルギー値に、トンネルイオン化でイオン化した電子の横運動量分布(Transverse Momentum Distribution = TMD)を定義することと併せて用いることで結果を得ている。

今回の研究は水素分子イオンに一樣な外部強電場成分を与えた時、その電場の大きさと核間距離による水素分子イオンのエネルギー変化の値を先行研究[1]と同様にシーガート法による解析で求め、それぞれの関係性を観察するものである。先行研究[1][2]と異なる点として、外部強静電場の向きと核間軸とが平行ではない点である。二原子分子において電場の向きと核間軸が平行である場合円筒対称性があり、核間軸を軸として分子を回転させても同じ結果が得られるが、角度をつけることで円筒対称性がなくなり回転させたときそれぞれ違う値が得られると考えられている。本研究ではこの角度を微量ではあるが $2^\circ$ として計算を行い、従来の平行な状態での計算結果を得るために用いたニュートン法を取り入れた計算用プログラムが有用であるか試験的に導入し、正常な動作によって有意な結果が得られるか確認する目的も含んでいる。

## 2. 理論

### 2-1. トンネルイオン化

トンネルイオン化とは、原子や分子に対し強い電場を与えたとき、原子核のクーロンポテンシャルが外部電場によって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イオン化することを指す。このときのエネルギー障壁を透過することをトンネル効果と呼び、トンネルイオン化とは特に光子の吸収によるイオン化ではなく光からの強い電場によるイオン化を指す。

### 2-2. $H_2^+$ のシュレディンガー方程式

$H_2^+$ 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る。電場 $\mathbf{F} = F_z$ でのシュレディンガー方程式は以下のように示される。

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

なお、本研究では以下のソフトクーロンポテンシャルを用いて計算を行った。

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\sqrt{|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}|^2 + \epsilon}} - \frac{1}{\sqrt{(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2})^2 + \epsilon}} \quad (2)$$

また計算では $\epsilon = 0.09$ とした。

ここで $\mathbf{R}$ は分子内における核間の位置ベクトルであり、

$$\mathbf{R} = (R \sin \beta, 0, R \cos \beta) \quad (3)$$

で表される。このとき $R$ は核間距離、 $\beta$ は核間軸と与える電場の向きの成す角である。

本研究は $\beta = 2^\circ$  の場合の計算であり、与える電場の大きさを $F = 0.000$  から  $0.005(a.u.)$  刻みで増加させ、 $F = 0.110$  までの範囲において核間距離 $R = 2, 3, 4, 5, 6, 7(a.u.)$  の値をそれぞれ計算した。

### 2-3. シーガート法

正則性と外向き波を境界条件として満たす定常状態のシュレディンガー方程式においては離散的で複素数を含むエネルギー固有値の解を持つ。この固有値問題を公式化し定めた解を Siegert States(SSs)と呼ぶ。以下、その原理を示す。

はじめに、放射座標系の定義を示す。

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi, & \xi &= r + z = r(1 + r\cos\theta), & 0 \leq \xi < \infty, \\ y &= \sqrt{\xi\eta}\sin\varphi, & \eta &= r - z = r(1 - r\cos\theta), & 0 \leq \eta < \infty, \\ z &= \frac{1}{2}(\xi - \eta), & \varphi &= \arctan\left(\frac{y}{x}\right), & 0 \leq \varphi < 2\pi, \\ r &= \frac{1}{2}(\xi + \eta) \end{aligned}$$

変数は $(\xi, \eta, \varphi)$ で表した。以降簡略化のため電子の質量 $m$ 、電荷素量 $e$ 、プランク定数 $\hbar$ 、ボーア半径 $a_0$ が $m = e = \hbar = a_0 = 1$ で定義される原子単位系(a.u.)を用いる。

電場中の SSs を計算するための放物座標系での断熱展開の基本方程式で要約して示す。核が固定されていると仮定・近似した単一電子分子と、外部静電場 $\mathbf{F} = F_z, F \geq 0$ の相互作用について考える。このとき原子単位系における電子の定常状態でのシュレディンガー方程式は以

下のよう示される。

$$\left[ -\frac{1}{2} \Delta + V(\mathbf{r}) + Fz - E \right] \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (4)$$

電子座標  $\mathbf{r}$  は分子の質量中心から測定され、ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  は外場に影響される核間距離と分子の向きによって決定される分子イオンの形状と分子イオンとの相互作用を含む。

放物座標を用いて式(4)を書き換える。

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} + B(\eta) + \frac{E\eta}{2} + \frac{F\eta^2}{4} \right] \psi(\xi, \eta, \varphi) = 0 \quad (5)$$

このとき  $B(\eta)$  は断熱ハミルトニアンで、以下の式で表される。

$$B(\eta) = \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\xi} + \frac{1}{\eta} \right) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\xi + \eta}{2} V(\xi, \eta, \varphi) + \frac{E\eta}{2} - \frac{F\eta^2}{4} \quad (6)$$

$B(\eta)$  は関数  $\xi$  や  $\varphi$  に作用する演算子かつパラメーター  $\eta$  に依存し、固有関数がそれぞれ以下のように示される。

$$[B(\eta) - \beta_\nu(\eta)] \Phi(\xi, \varphi; \eta) = 0 \quad (7a)$$

$$\Phi_\nu(\xi = 0, \varphi; \eta) < \infty, \quad \Phi_\nu(\xi \rightarrow \infty, \varphi; \eta) = 0 \quad (7b)$$

$$\Phi_\nu(\xi, \varphi + 2\pi; \eta) = \Phi_\nu(\xi, \varphi; \eta) \quad (7c)$$

固有関数  $\Phi_\nu(\xi, \varphi; \eta)$  は実数になるよう選択し、固有値  $\beta_\nu(\eta)$  は  $F = 0$  において実数となる。この

とき式(5)の解は  $\nu = 1, 2, \dots$  で決められ、 $\beta_\nu(\eta)$  の次数は下がっていき、式(4)のエネルギー  $E$

が複素数になることで固有値  $\beta_\nu(\eta)$  も複素数になる。

ここからすべての任意の  $\eta$  に対して直交し正規化する式は以下のように表される。

$$\langle \Phi_\nu | \Phi_\mu \rangle \equiv \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \Phi_\nu(\xi, \varphi; \eta) \Phi_\mu(\xi, \varphi; \eta) d\xi d\varphi = \delta_{\nu\mu} \quad (8)$$

ここで空間内を分割し、外側  $\eta > \eta_c$  ・内側  $\eta < \eta_c$  となる  $\eta_c$  を置くと式(1)中のポテンシャル

$V(\mathbf{r})$  を以下のように仮定する。

$$V(\mathbf{r})|_{\eta>\eta_c} = -\frac{Z}{r} \quad (9)$$

このとき  $Z$  は分子イオン全体の電荷である。

これらから断熱ハミルトニアン  $B$  は漸近領域で  $\eta$  への依存性は以下のようになる。

$$B = B(\eta)|_{\eta \rightarrow \infty} = \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{1}{4\xi} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + Z + \frac{E\eta}{2} - \frac{F\eta^2}{4} \quad (10)$$

同様に固有値  $\beta_\nu(\eta)$ 、固有関数  $\Phi_\nu(\xi, \varphi)$  は以下のようになる。

$$\beta_\nu(\eta) = \beta_\nu(\eta)|_{\eta \rightarrow \infty}, \quad \Phi_\nu(\xi, \varphi) = \Phi_\nu(\xi, \varphi; \eta)|_{\eta \rightarrow \infty} \quad (11)$$

従って式(7a)が以下のようになる。

$$(B - \beta_\nu)\Phi_\nu(\xi, \varphi) = 0 \quad (12)$$

この式は外側領域のとき分離可能で、その解は以下のように示される。

$$\Phi_{n_\xi m}(\xi, \eta) = \varphi_{n_\xi |m|}(\xi) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (13)$$

これを用いて  $\beta_{n_\xi |m|}$  は以下のようになる。

$$\left[ \frac{d}{d\xi} \xi \frac{d}{d\xi} + \frac{m^2}{4\xi} + Z + \frac{E\eta}{2} - \frac{F\eta^2}{4} - \beta_{n_\xi |m|} \right] \varphi_{n_\xi |m|}(\xi) = 0 \quad (14a)$$

$$\varphi_{n_\xi |m|}(\xi \rightarrow 0) \propto \xi^{|m|/2}, \quad \varphi_{n_\xi |m|}(\xi \rightarrow \infty) = 0 \quad (14b)$$

$$\int_0^\infty \varphi_{n_\xi |m|}(\xi) \varphi_{n'_\xi |m|}(\xi) d\xi = \delta_{n_\xi n'_\xi} \quad (14c)$$

式(14)には方位量子数  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  と、 $n_\xi = 0, 1, 2, \dots$  によって与えられた  $|m|$  の値に対す

る式(14a)の別の解が含まれる。

式(11)のうち左の式は

$$\beta_\nu = \beta_{n_\xi |m|}, \quad \beta_\nu(\eta)|_{\eta>\eta_c} = \beta_{n_\xi |m|} - \frac{m^2}{4\eta} \quad (15a)$$

$$\Phi_\nu(\xi, \varphi) = \begin{cases} \Phi_{n_\xi 0} & (m = 0) \\ e^{\frac{i(\lambda-1)\pi}{4}} \left[ c_{|m|} \Phi_{n_\xi |m|}(\xi, \varphi) + \lambda * c_{|m|} \Phi_{n_\xi - |m|}(\xi, \varphi) \right] & (m \neq 0) \end{cases} \quad (15b)$$

で与えられ、 $\lambda = \pm 1$ では係数 $c_{|m|}$ は $|c_{|m|}|^2 = 1$ を満たし、これらの係数は $V(\mathbf{r})|_{r \rightarrow \infty}$ とすることで決定される。また式(15)からは、外側領域で断熱チャンネルを以下のように表せる。

$$v = (n_\xi, |m|, \lambda) \quad (16)$$

これは連続性から式(7)の解の漸近量子数による分類はすべての $\eta$ に適用することができ、以降( $v$ )として記述する。

このように断熱基底を定義したところで式(2)の解を断熱展開の形で求めると以下のようになる。

$$\psi(\xi, \eta, \varphi) = \sum_v f_v(\eta) \Phi_v(\xi, \varphi; \eta) \quad (17)$$

これを式(5)に代入し、未知の関数 $f_v(\eta)$ を含む連立常微分方程式が得られ、外側領域において以下の式が得られる。

$$\left[ \frac{d}{d\eta} \eta \frac{d}{d\eta} + \beta_v(\eta) + \frac{E\eta}{2} + \frac{F\eta^2}{4} \right] f_v(\eta) + \sum_\mu \left[ P_{v\mu}(\eta) (2\eta \frac{d}{d\eta} + 1) + \eta Q_{v\mu}(\eta) \right] f_\mu(\eta) = 0 \quad (18)$$

なお、

$$P_{v\mu}(\eta) = \langle \Phi_v | \frac{\partial \Phi_\mu}{\partial \eta} \rangle, \quad Q_{v\mu}(\eta) = \langle \Phi_v | \frac{\partial^2 \Phi_\mu}{\partial \eta^2} \rangle \quad (19)$$

で、これらは非断熱結合を意味する。外側領域では式(11)から以下の式が導かれる。

$$\left[ \frac{d^2}{d\eta^2} + \frac{1-m^2}{4\eta^2} + \frac{\beta_{n_\xi|m|}}{\eta} + \frac{E}{2} + \frac{F\eta}{4} \right] \eta^{\frac{1}{2}} f_v(\eta) = 0 \quad (20)$$

電場が0ではなく $F > 0$ かつ外向き波であれば $\eta \rightarrow \infty$ の境界条件として、

$$f_v(\eta)|_{\eta \rightarrow \infty} = \frac{\frac{1}{2^2} f_v}{F^{\frac{1}{4}} \eta^{\frac{3}{4}}} \exp \left[ \frac{iF^{\frac{1}{2}} \eta^{\frac{3}{2}}}{3} + \frac{iE\eta^{\frac{1}{2}}}{F^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (21)$$

が満たされる。

式(20)が $\eta \rightarrow 0$ における境界条件と、外向き波の $\eta \rightarrow \infty$ における境界条件である式(21)を満た

すとき固有値問題となり、その解 $E$ が固有値 SSs である。 $E$  は必ず離散的で一般には複素数を  
含むが、エネルギー  $\varepsilon$  とトンネルイオン化レート  $\Gamma$  を用いて以下の式で表される。

$$E = \varepsilon - \frac{i}{2}\Gamma \quad (22)$$

また、SSs の固有関数は以下の式で正規化される。

$$\int \varphi^2(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \frac{1}{4} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \varphi^2(\mathbf{r})(\xi + \eta)d\xi d\eta d\varphi = 1 \quad (23)$$

この積分では  $\eta$  を実軸から複素平面上に拡張し規格化する必要がある。ここで式(4)における  
外向き波の境界条件は以下のようになる。

$$\varphi(\mathbf{r})|_{z \rightarrow \infty} = \int A(\boldsymbol{\kappa}_\perp) e^{i\boldsymbol{\kappa}_\perp \mathbf{r}_\perp} g(z, \boldsymbol{\kappa}_\perp) \frac{\boldsymbol{\kappa}_\perp}{(2\pi)^2} \quad (24a)$$

$$\mathbf{r}_\perp = (x, y) = (r_\perp \cos\varphi, r_\perp \sin\varphi), \quad \boldsymbol{\kappa}_\perp = (\kappa_x \cos\varphi_\kappa, \kappa_y \sin\varphi_\kappa) \quad (24b)$$

このとき、

$$g(z, \boldsymbol{\kappa}_\perp) = e^{-\frac{i\pi}{12} 2\pi^{\frac{1}{2}} (2F)^{-\frac{1}{6}} Ai(\zeta)} \quad (25)$$

$$\zeta = \frac{2e^{-\frac{i\pi}{3}}}{(2F)^{-\frac{2}{3}}} \left[ E - Fz - \frac{\boldsymbol{\kappa}_\perp^2}{2} \right] \quad (26)$$

であり、 $Ai(x)$  は Airy 関数である。関数  $g(z, \boldsymbol{\kappa}_\perp)$  は  $z \rightarrow \infty$  での外向き波のみを含み、 $A(\boldsymbol{\kappa}_\perp)$  は  
トンネルイオン化によるイオン化電子の横運動量分布(TMD)の振幅を以下のように示す。

$$A(\boldsymbol{\kappa}_\perp) = \frac{2^{\frac{2}{3}} \pi i}{F^{\frac{1}{2}}} \left| \sum_\nu f_\nu \Phi_\nu \left( \frac{\boldsymbol{\kappa}_\perp^2}{F}, \varphi_\kappa \right) \right|^2 \quad (27)$$

式(27)よりイオン化電子の TMD は以下のように表される。

$$P(\boldsymbol{\kappa}_\perp) \equiv |A(\boldsymbol{\kappa}_\perp)|^2 = \frac{8\pi^2}{F} \left| \sum_\nu f_\nu \Phi_\nu \left( \frac{\boldsymbol{\kappa}_\perp^2}{F}, \varphi_\kappa \right) \right|^2 \quad (28)$$

### 3. 計算結果

計算によって求められた水素分子イオン $H_2^+$ のシーガート状態の解のうち実数部分  $\varepsilon$  と与えられた電場の大きさ  $F$ 、核間距離  $R$  に関する結果を先に提示する。

以下のグラフは核間距離ごとの解の実数部分と与える電場の大きさの関係性を示すものである。

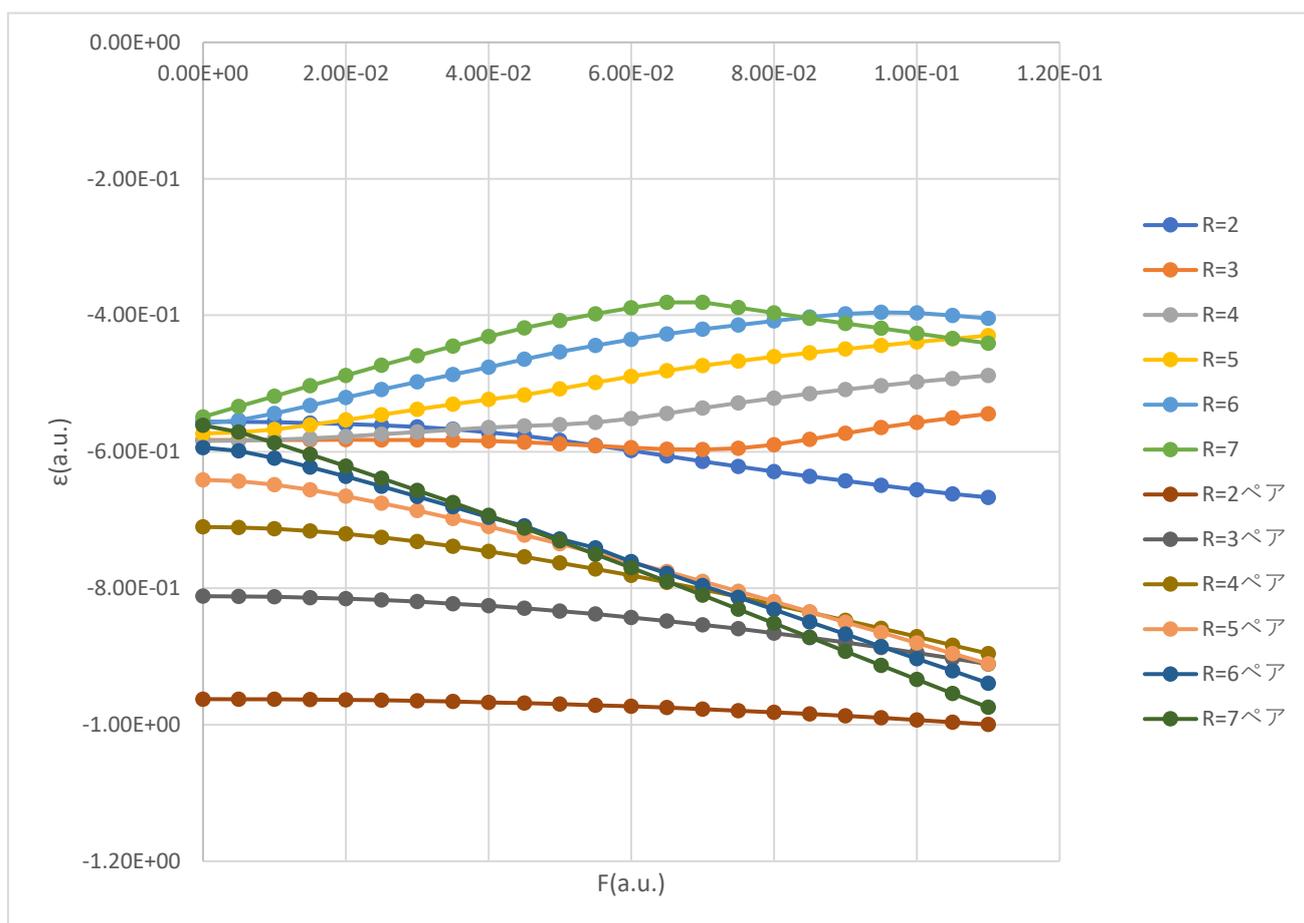


図 1. 核間距離  $R$  ごとによるエネルギー実数部分  $\varepsilon$  と与えた電場の大きさ  $F$  の関係性

次に示すのは、与える電場の大きさごとの解の実数部分と核間距離の関係性を示したものである。

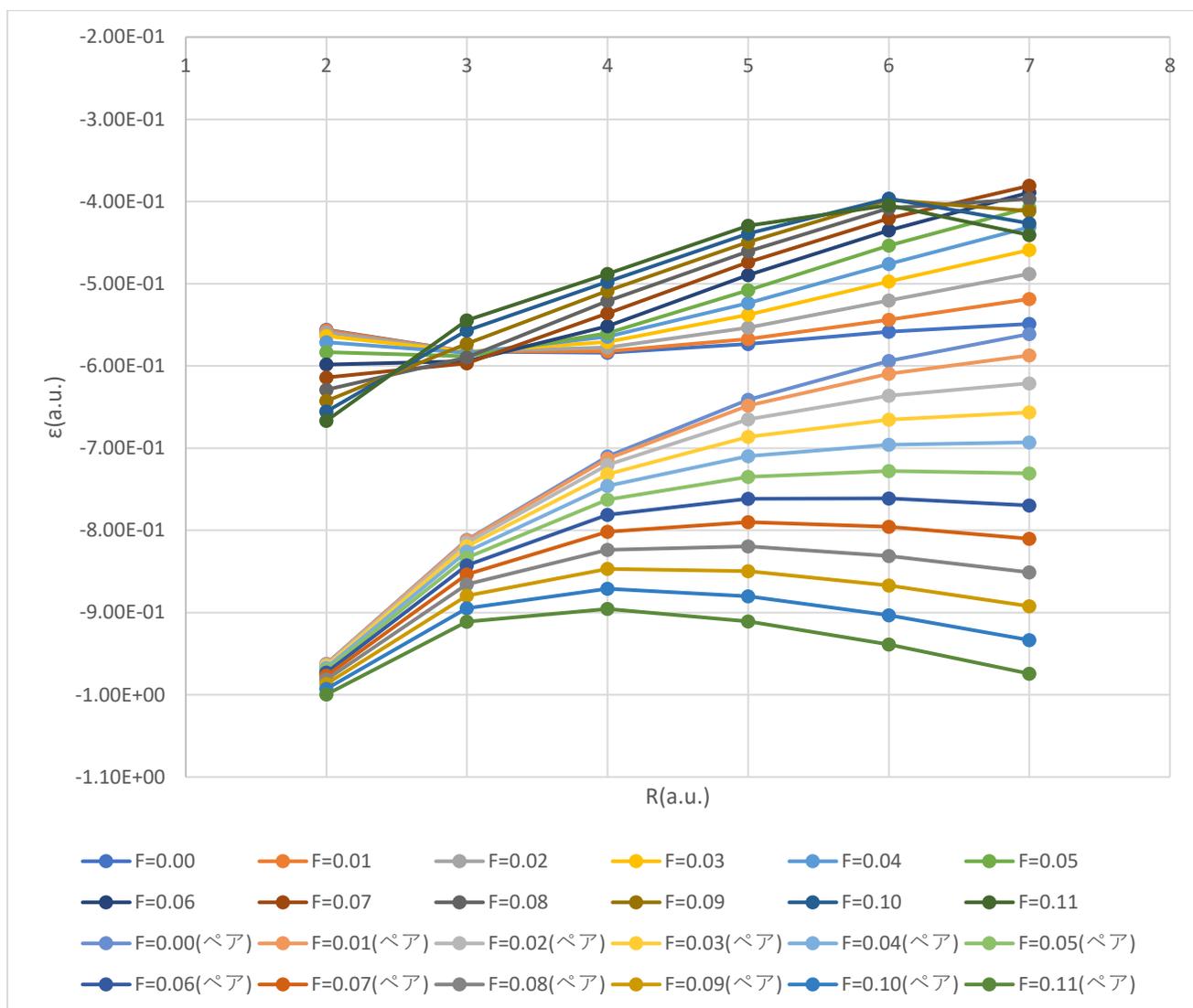


図 2. 与えられた電場の大きさごとによるエネルギー実数部分と核間距離の関係性

先述の通り、本研究は与えた電場と核間軸の成す角  $\beta$  が  $2^\circ$  の場合であり、与える電場の大きさを  $F = 0.000$  から  $0.005(a.u.)$  刻みで増加させ、 $F = 0.110$  までの範囲において核間距離  $R = 2, 3, 4, 5, 6, 7(a.u.)$  での値をそれぞれ計算した。図 1・2 の両グラフに見られるように同じ

条件で2つの解が得られるのは、 $F = 0.000$ のとき  $\varepsilon$  の値が低い方からの系列が $1s\sigma_g$ 、高い方が $2p\sigma_u$ を示しており、シュタルク効果によってエネルギー準位が分裂していることから同条件で2つの値が得られている。図中では便宜上低い方の系列をペアと呼称している。

図2からは電場を大きくするとどちらの状態のエネルギー準位も変化し、 $2p\sigma_u$ はエネルギーが上がり、 $1s\sigma_g$ では下がる傾向にあるが、 $R = 7$ において $F = 0.060$ 付近から電場を大きくすると $2p\sigma_u$ ではエネルギーが下がることが図1からもわかる。

また、次に示すのは解の虚数部分 $\Gamma$ に関して実数部分 $\varepsilon$ と同様に、核間距離ごとの与える電場の大きさの関係性を示すグラフと、与える電場の大きさごとの解の実数部分と核間距離の関係性を示したグラフである。

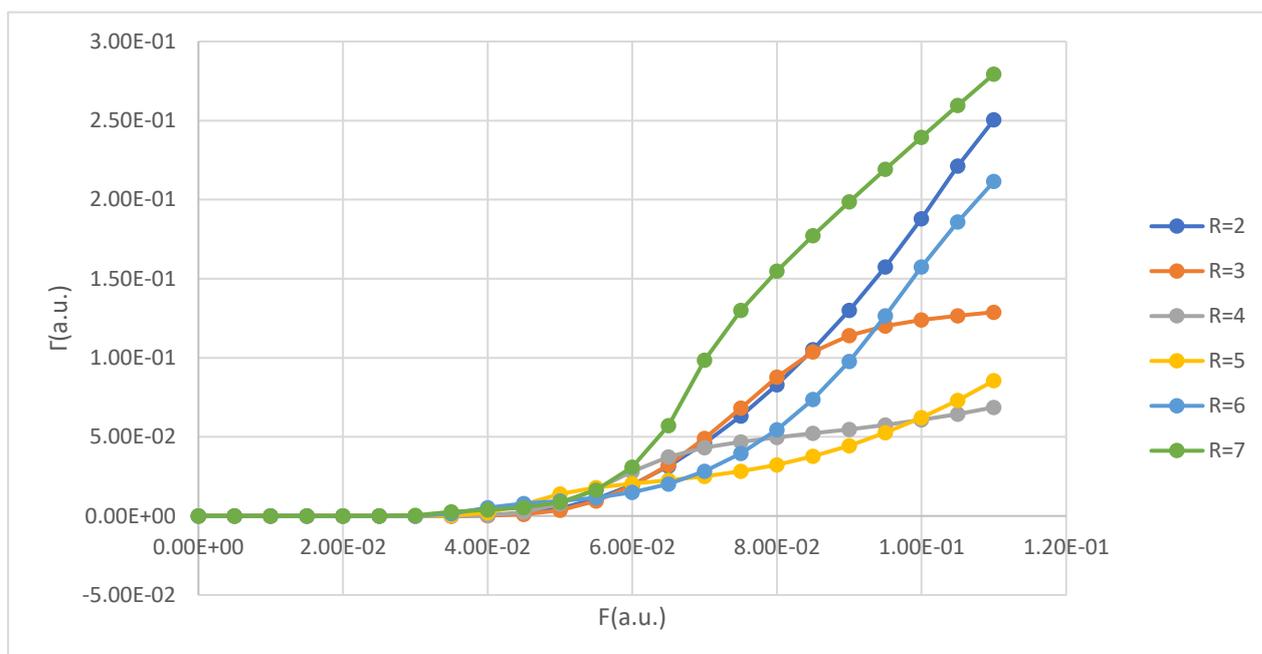


図3. 核間距離  $R$  ごとによるエネルギー虚数部分 $\Gamma$ と与えた電場の大きさ  $F$  の関係性( $2p\sigma_u$ )

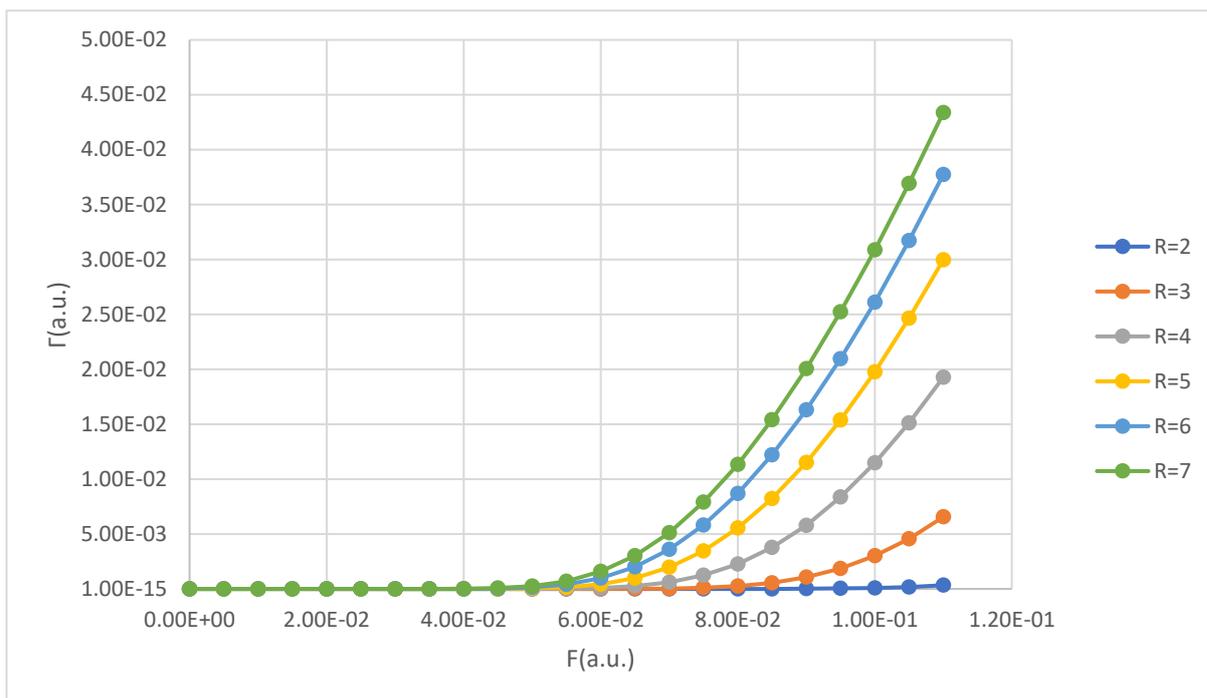


図 4. 核間距離  $R$  ごとによるエネルギー虚数部分  $\Gamma$  と与えた電場の大きさ  $F$  の関係性 ( $1s\sigma_g$ )

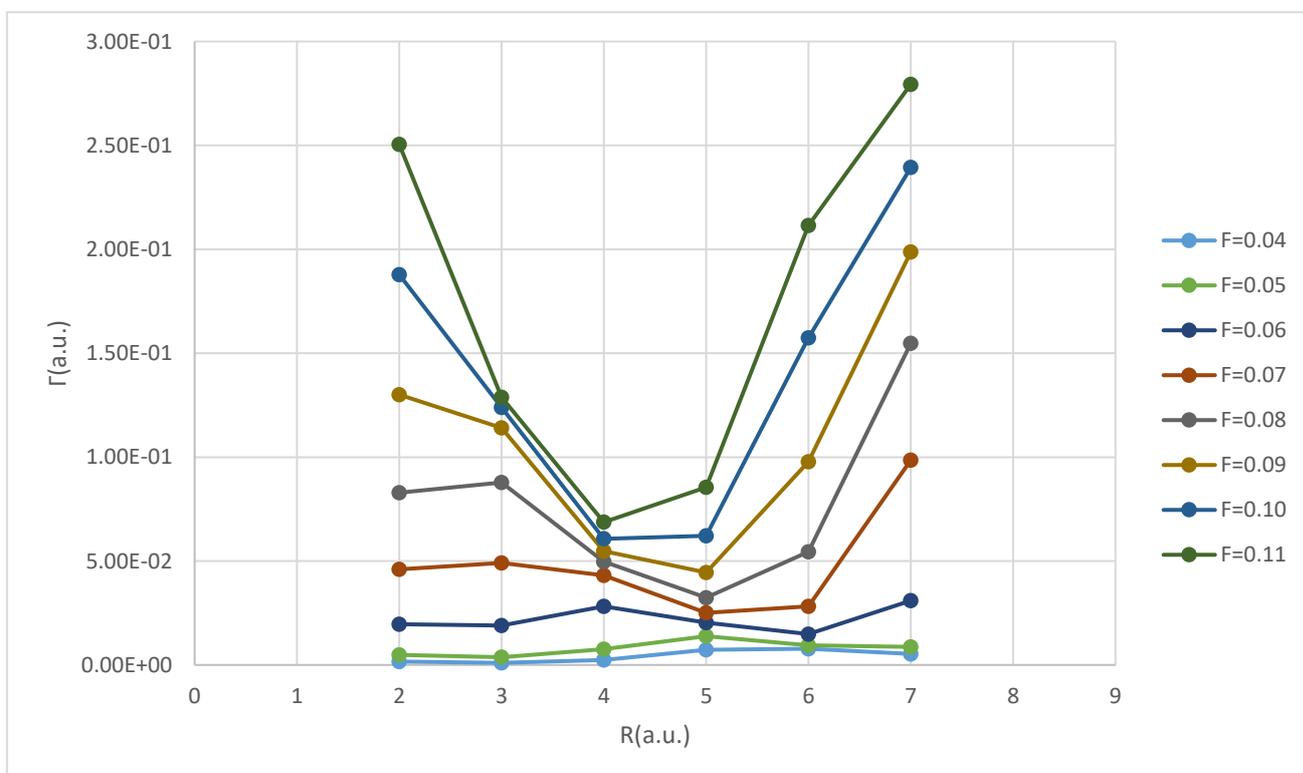


図 5. 与えられた電場の大きさごとによるエネルギー虚数部分と核間距離の関係性 ( $2p\sigma_u$ )

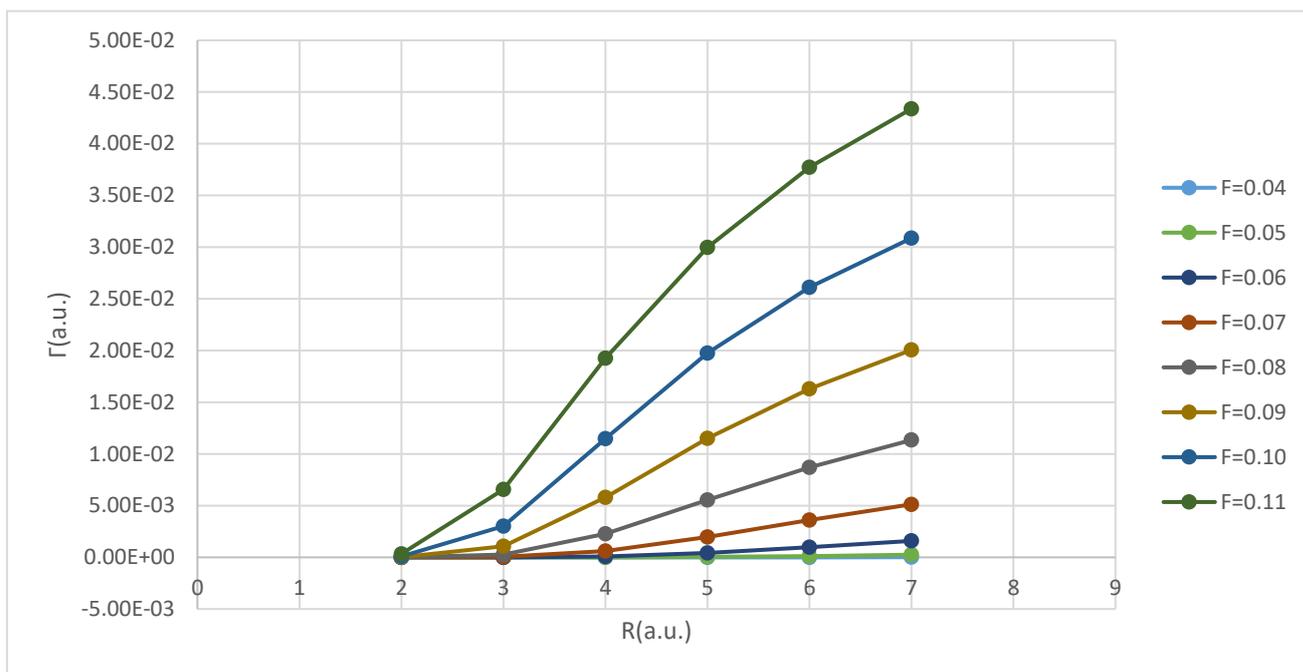


図 6 与えられた電場の大きさごとによるエネルギー虚数部分と核間距離の関係性( $1s\sigma_g$ )

また、図 5・6 軸をそれぞれ対数目盛にしたグラフも以下に示す。

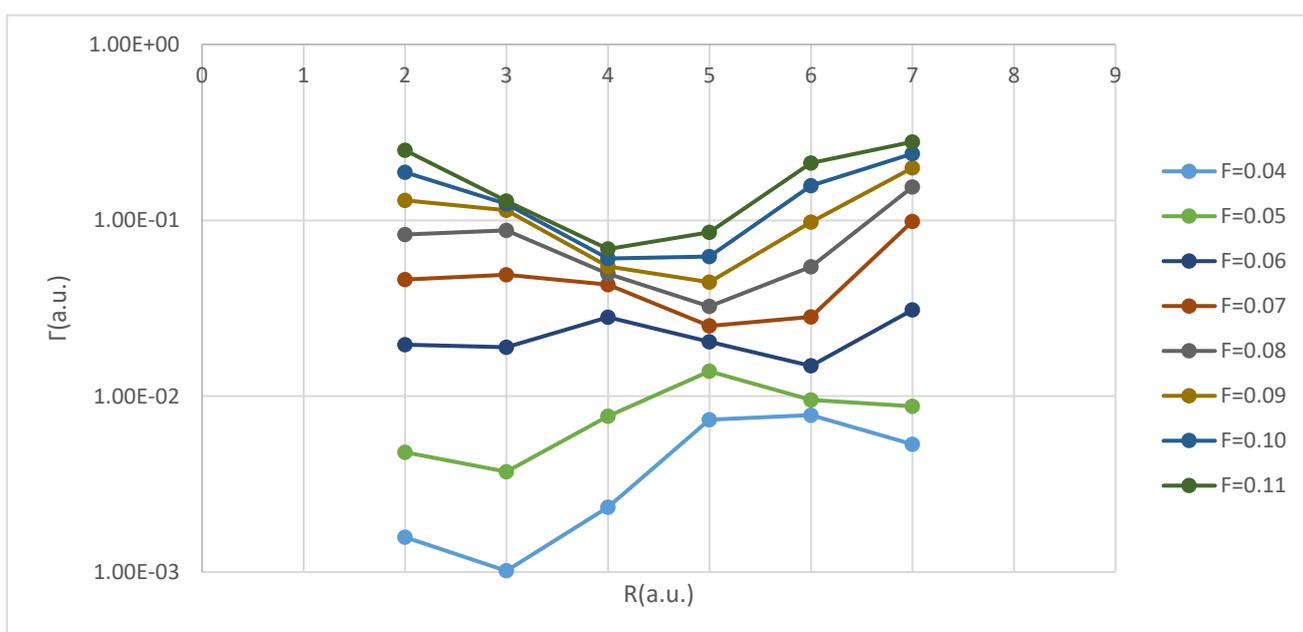


図 7. 図 5 縦軸を対数目盛で表したグラフ

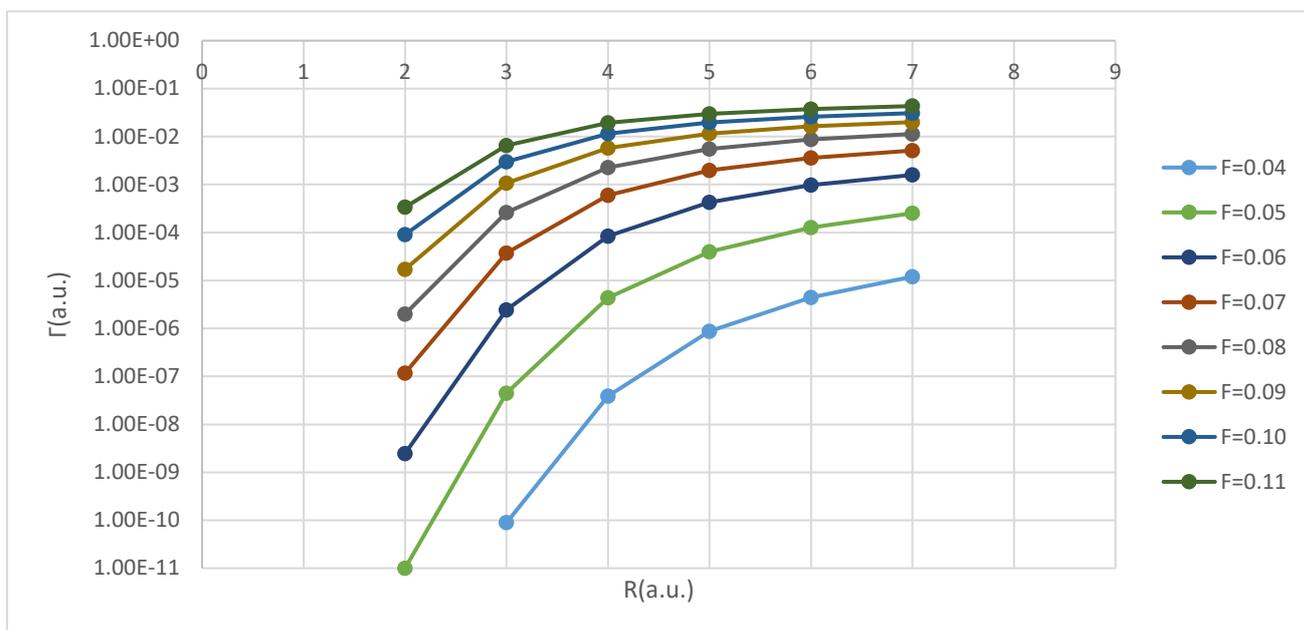
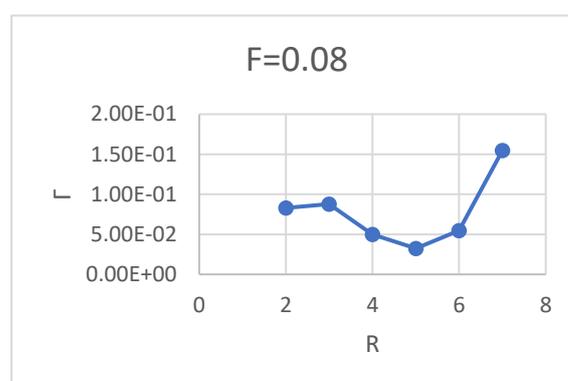
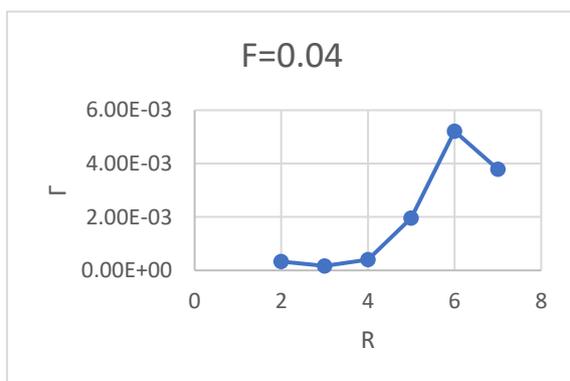


図 8. 図 6 縦軸を対数目盛で表したグラフ



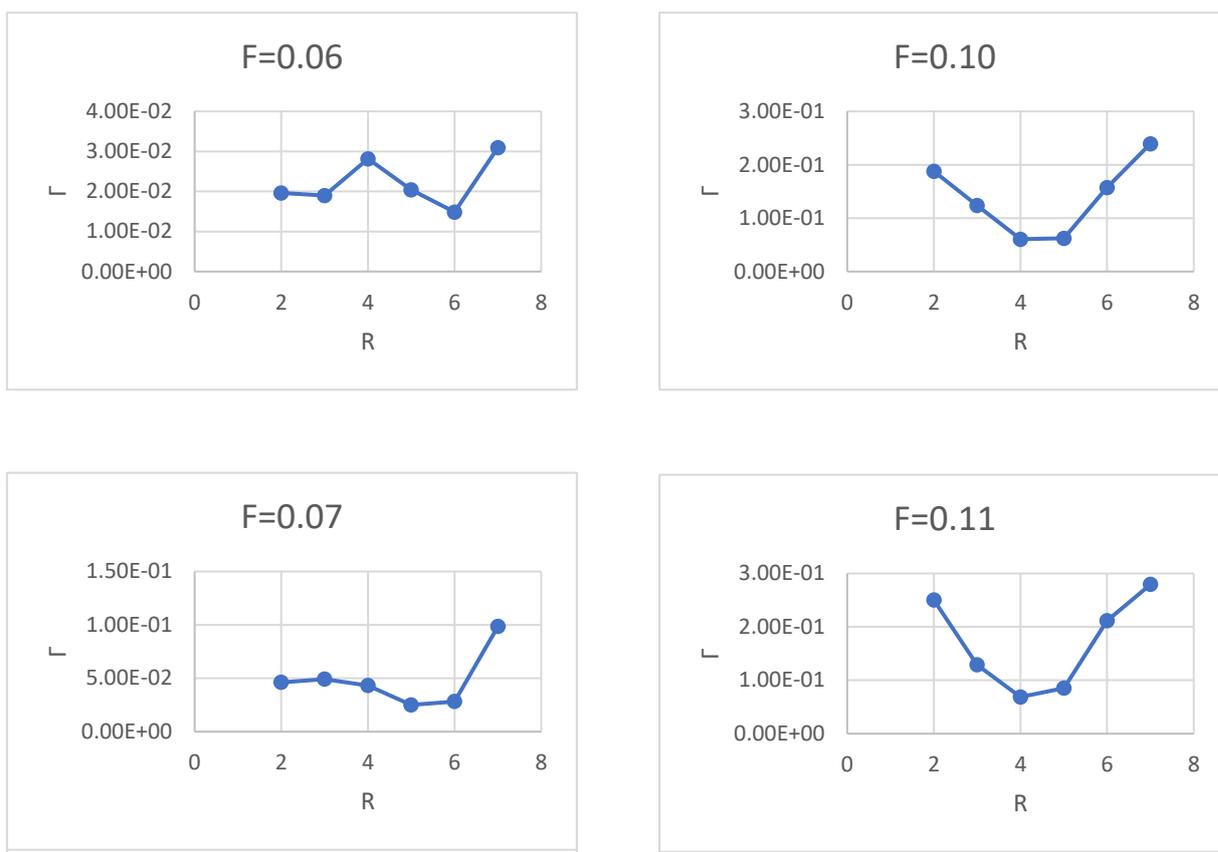


図 9. 図 5 のグラフを各系列に分けたグラフ

図 3 から、 $\Gamma$  の値は  $F = 0.000 \sim 0.030$  の範囲においては 0 に近く、 $10^{-10}$  前後の非常に小さい値をとるため、 $\Gamma$  と核間距離の関係性を示した図 5・6 および 7・8 のグラフでは  $F = 0.040$  以上の結果をグラフに表示した。図 5・7 からは  $2p\sigma_u$  におけるトンネルイオン化レートのグラフが比較的複雑であることから電場の大きさごとに分けたグラフを作成し、図 9 として示したが、この図 9 からトンネルイオン化レートのピークがそれぞれ確認でき、特に  $F = 0.06$  以降のグラフでは、 $R = 7$  以降でピークがあると考えられるグラフ構造をとっている。このことから  $R = 7$  より大きい核間距離において、分子イオンの状態が変化する点があると考えた。

また図 3 から、エネルギー  $\varepsilon$  ほどではないが  $\Gamma$  でも  $F = 0.060$  付近から下がっていくことが読み取れる。このことから  $2p\sigma_u$  準位の  $R = 7 \cdot F = 0.060$  付近からは、さらに上のエネルギー準位のデータと交わっている点がある可能性があると考え、以降この点を A 点と呼称する。図 2 から A 点以降、電場の大きさが大きい方が小さい方に比べ低いエネルギーになっていることに加え、 $1s\sigma_g$  準位のグラフにおいて  $R = 2$  系列が最もエネルギーが低く減少傾向にあることから、A 点において  $2p\sigma_u$  準位のさらに 1 つ上の準位の最も低いエネルギー系列が減少していくうちに介入してきたと十分に考えられるだろう。

計算のためプログラムを走らせる際、特に  $R = 7$  ではニュートン法の計算過程がループしてしまうなど、非常に結果を得ることが難しかったが、 $F = 0.000$  からではなく  $F = 0.04$  からあたりをつけて計算させできるだけ多くのデータを得たのち計算が終了した地点を次の始点として再び計算を始めることで結果を得ることができた。 $F = 0.04$  以降の結果を得たのち  $F = 0.04$  から電場の大きさを下げる方向に計算を進めさせ、 $F = 0.04$  より大きい範囲と同様に結果を得るように工夫した。 $R = 7$  で結果を得ることが難しかったのは、 $1s\sigma_g$  準位と  $2p\sigma_u$  準位での  $F = 0.00$  におけるエネルギーの値が非常に近いことと、A 点付近でエネルギー値の単純増加傾向に変化があったことに原因があると考えた。

また、得られた A 点以降のデータが上の準位での  $\varepsilon \cdot \Gamma$  の値を示していると考えられたため、A 点までのデータを元に本来の  $2p\sigma_u$  準位での  $\varepsilon \cdot \Gamma$  の値を予想し計算プログラムを走らせたが、有意な結果を得ることはできなかった。そのため今後の研究において水素分子イオンの  $2p\sigma_u$  準位より上の準位を計算させる場合や  $2p\sigma_u$  準位での本来の値を得るためには、現行のプログ

ラムに対して別の手を加える必要があるだろうとした。

## 4. 結論

本研究では、水素分子イオン $H_2^+$ の与えた電場の向きと核間軸の成す角が $2^\circ$ の場合における複素エネルギー準位をシーガート法によって解析し、外部強静電場の大きさ・核間距離で大きく変化することを観察・確認した。結果からはシュタルク効果によって分裂したエネルギー準位 $2p\sigma_u$ 準位では核間距離 $R = 7$ より広く、かつ $F = 0.060$ より強い電場を与えるときさらに上の準位のエネルギー状態による介入があると考えられた。計算用プログラムの試験運用の観点からは、この領域において $2p\sigma_u$ 準位本来の値を得るためには今回データを得るために行った工夫の他に新たに手を加える必要があると考え、今後の研究の課題となるとした。

またトンネルイオン化レート $\Gamma$ についても $R = 7$ より広い領域において $F = 0.060$ より強い電場を与えると強いピークがあるだろうと予想された。先行研究[1]では $\beta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ における結果を示しておりこちらとは異なる条件を計算で結果を得られたが、先行研究[2]では与えた電場の向きと核間軸の成す角 $\beta$ を $0^\circ$ として同様の研究を行っており、 $\beta$ を $2^\circ$ として計算した本研究から得られた結果と非常に似た結果が得られていることが各グラフの概形から確認でき、本研究で得られたデータが有意なものであると考えられる。このことからトンネルイオン化レート $\Gamma$ についての結果も同様に有意なものであると考え、先行研究[2]と同様に本研究での条件下でトンネルイオン化レート $\Gamma$ には $R = 7$ より広い領域にお

いて強いピークを示す点があると考えた。

## 謝辞

本研究を進めるにあたって、森下先生には化学生命工学プログラム所属の自分にできるだけイメージのしやすい研究内容を提案していただき、研究においても多大なるご指導・ご助言を頂きました。さらに研究室の先輩方や同期の小島君には輪講や研究発表についての質問に答えていただき、これらのご助力によって本研究を卒業論文として形にできたことを、ここに深く感謝いたします。

## 参考文献

- [1] Linda Hamonou,<sup>1</sup> Toru Morishita,<sup>1</sup> and Oleg I. Tolstikhin, Molecular Siegert states in an electric field, *Phys. Rev. A* 86, 013412 (2012).
- [2] 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.
- [3] PHAM NGUYEN THANH VINH, Molecular Siegert states in an electric field, 2014 年度修士論文.