

一様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

森下研究室

1910277 齋藤祐大

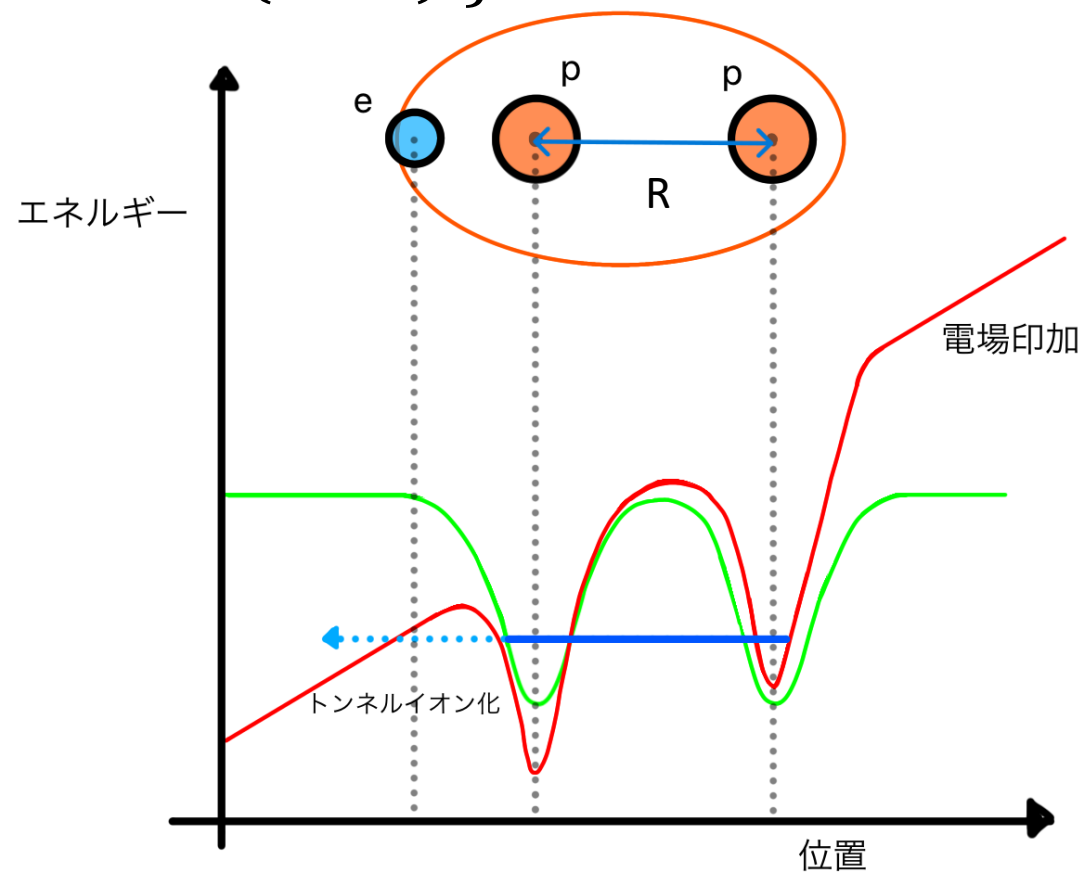
背景

高強度レーザーを用いた実験

$$I = 3.5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$$
$$\{ F \approx 0.1(a.u.) \}$$



代表的なテーマのひとつ
「トンネルイオン化」



シーガート法

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

運動エネルギー

分子ポテンシャル

静電ポテンシャル
(電場の大きさ)

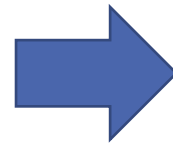
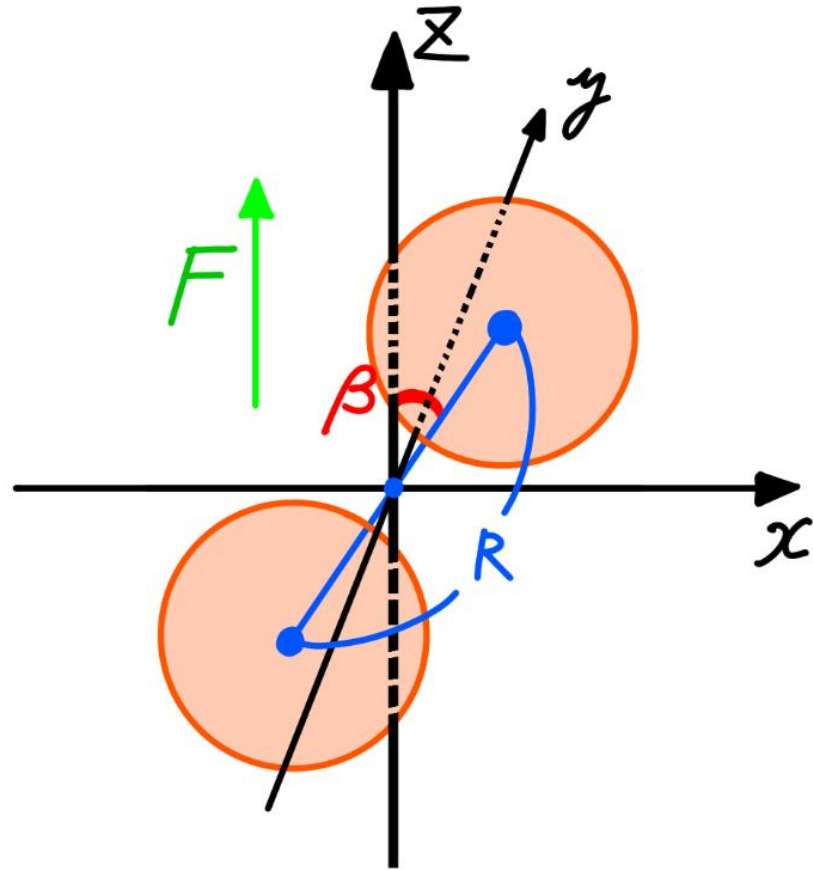
複素エネルギー

正則・外向き波境界条件下で固有解を持つ。

➡ $E = \varepsilon - \frac{i}{2}\Gamma$ { ε : エネルギー, Γ : トンネルイオン化レート}

本研究では ε 、 $-\frac{\Gamma}{2}$ の値を設定し、近い解を探しつつ計算を進めるシューティング法を用いた。

H_2^+ に対する核間距離 R と配向角 β



$\beta \neq 0^\circ$ において円筒対称性を喪失する。

目的

先行研究[1]

- $\beta = 0^\circ$ (電場の向きと分子軸が並行)
- 円筒対称性を考慮したプログラム
(2次元領域(分子断面)で計算する)
- 平衡核間距離を変えて計算を行う
→核間距離を大きくすると計算が不安定になりやすい

先行研究[2]

- $\beta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$
- 一般的な配向角を扱うプログラムで、
3次元領域における計算を行う
→計算量が多い

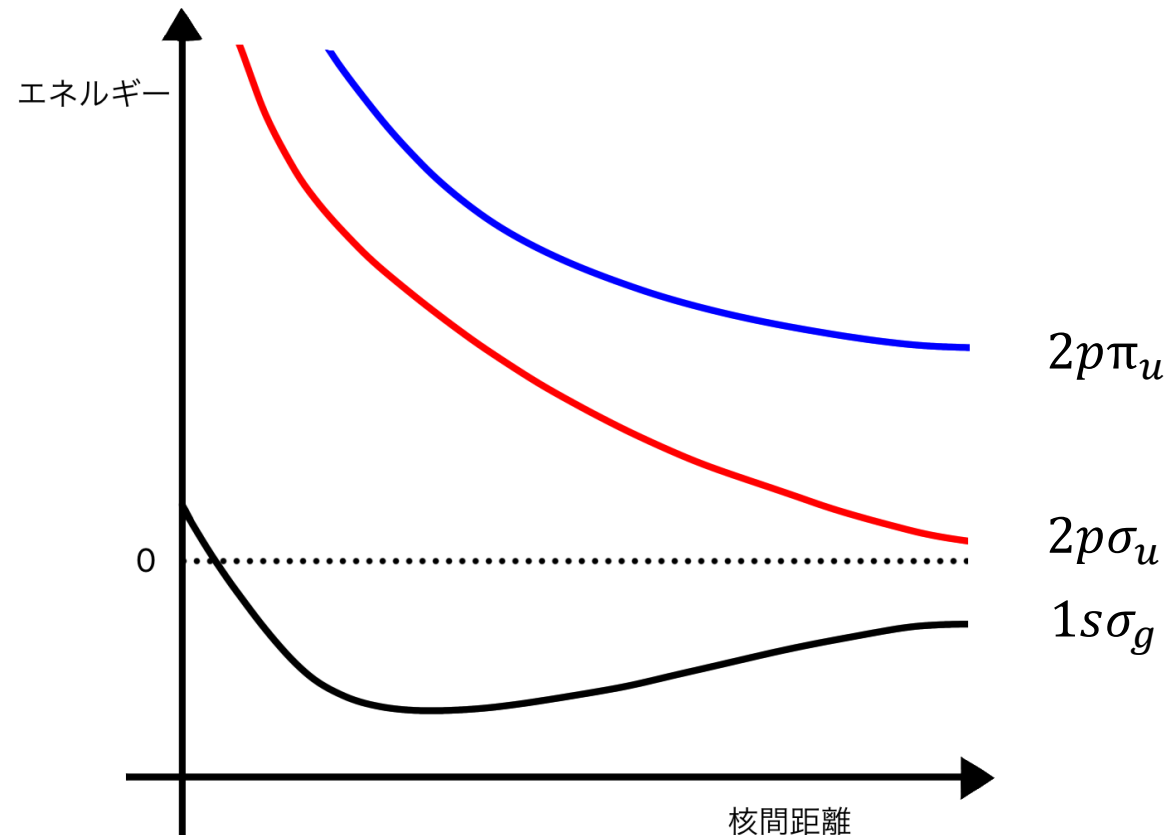
★ 本研究では一般的な配向角を扱うプログラムで3次元領域における円筒対称性のない $\beta = 2^\circ$ の場合を平衡核間距離を変えて計算

➡ まだ行われていない組み合わせにおいて、一般的な配向角を扱うプログラムによる計算で円筒対称性を考慮したプログラムと同様の運用が可能かを確かめる

計算結果 (E の核間距離依存性)

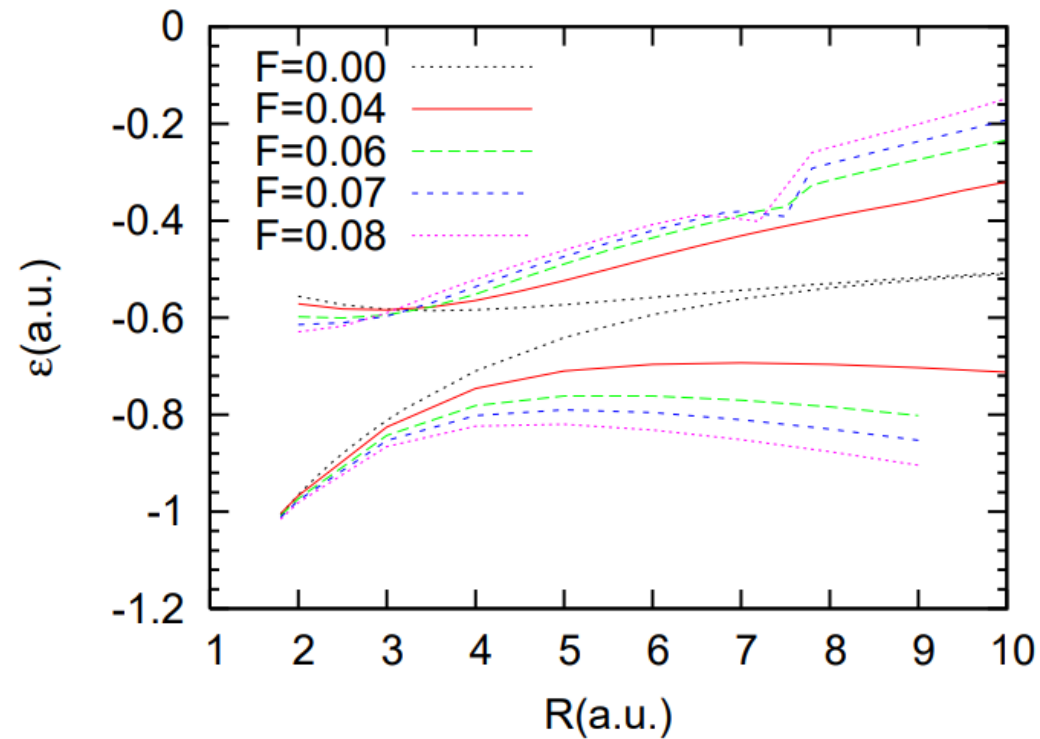
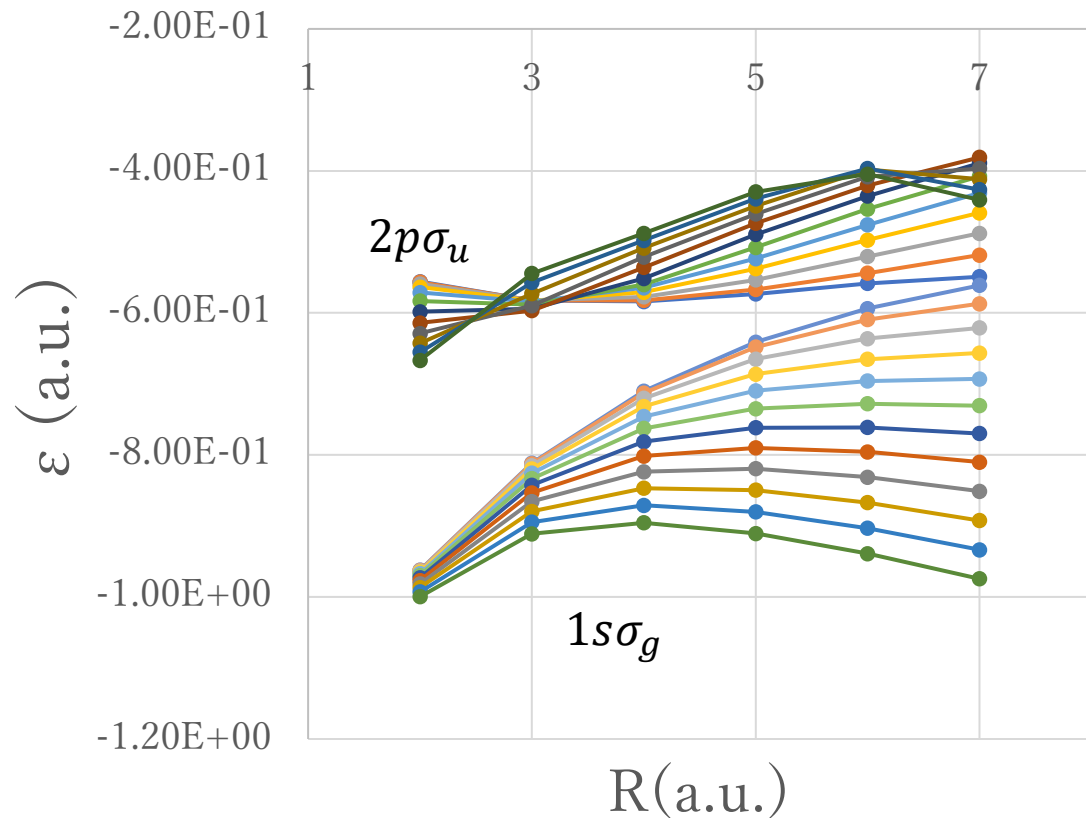
* $\beta = 2^\circ$

水素分子イオンのエネルギー準位



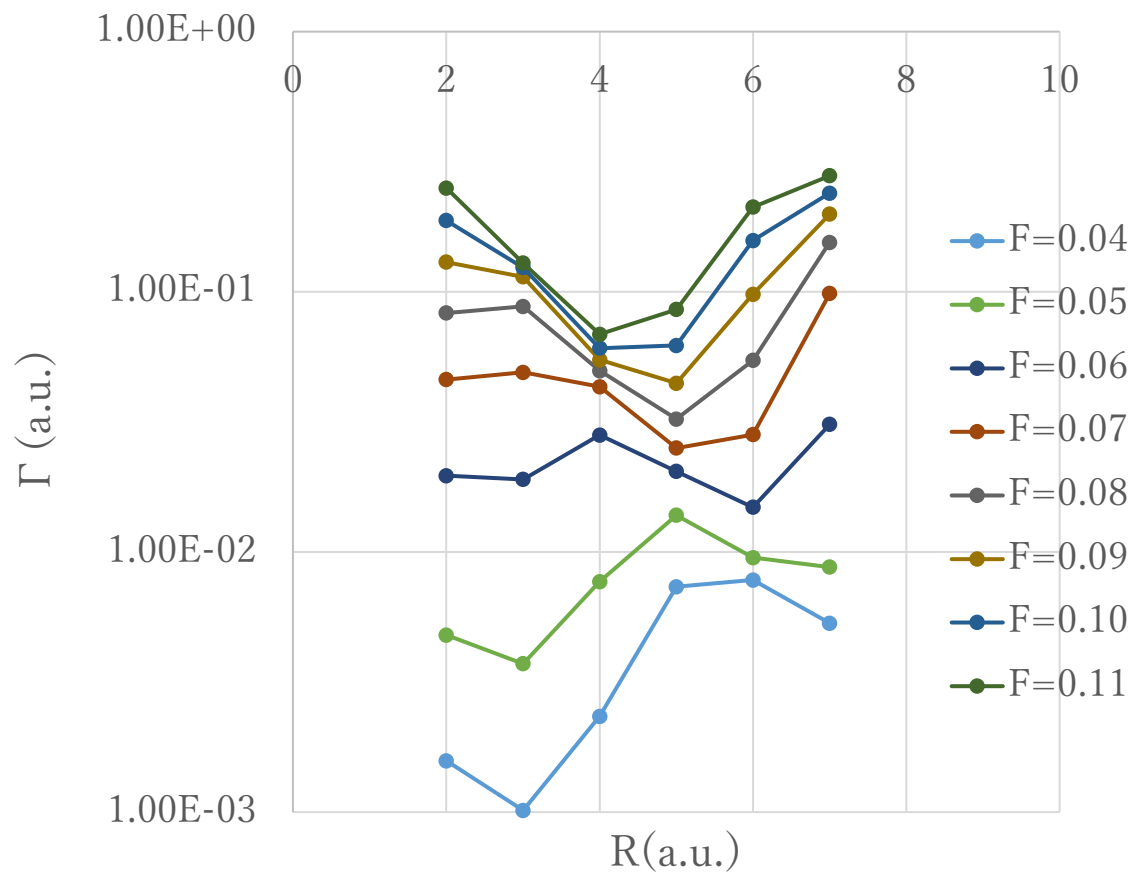
本研究では $2p\sigma_u$ 、 $1s\sigma_g$ 準位を計算する。

$2p\sigma_u$ ←
 $1s\sigma_g$ ←

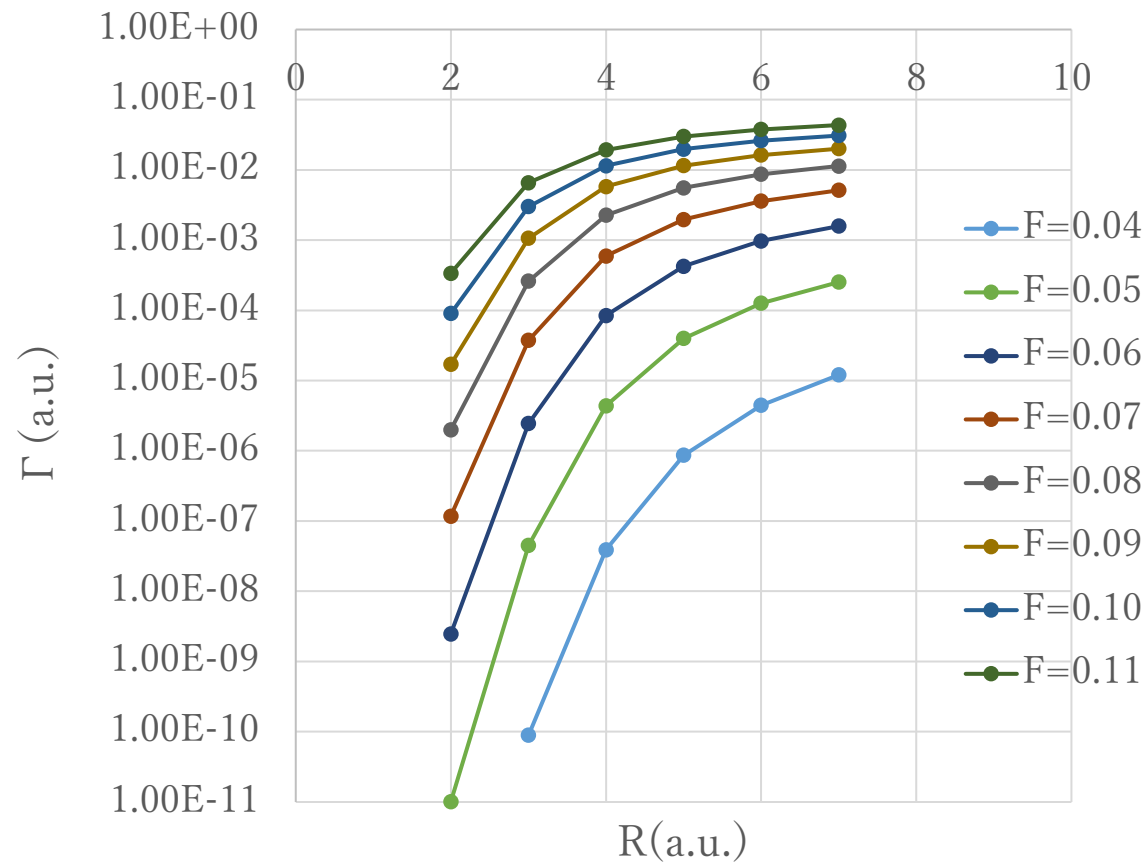


水越アレックス春彦, 強電場中の水素分子イオンの複素エネルギー準位, 2013年度卒業論文.

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



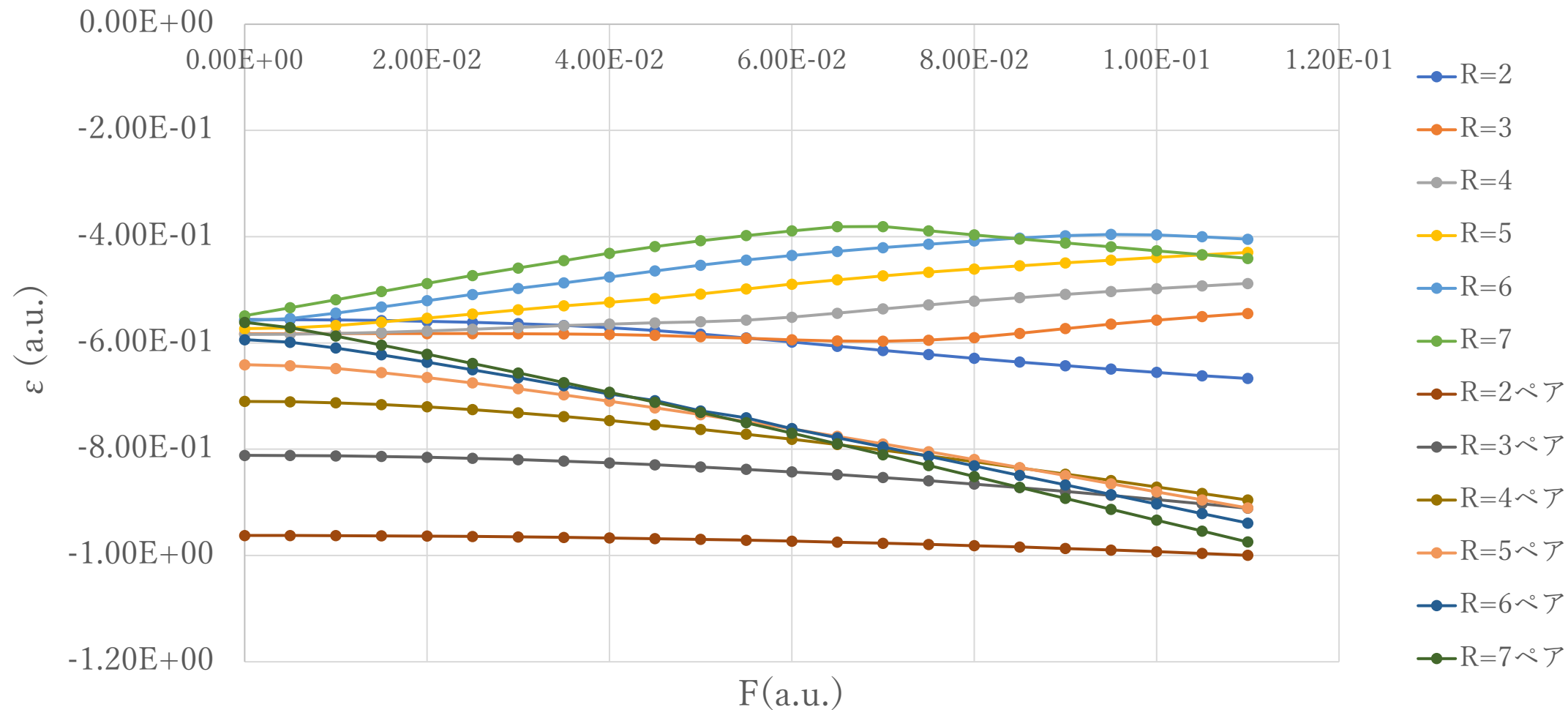
$2p\sigma_u$



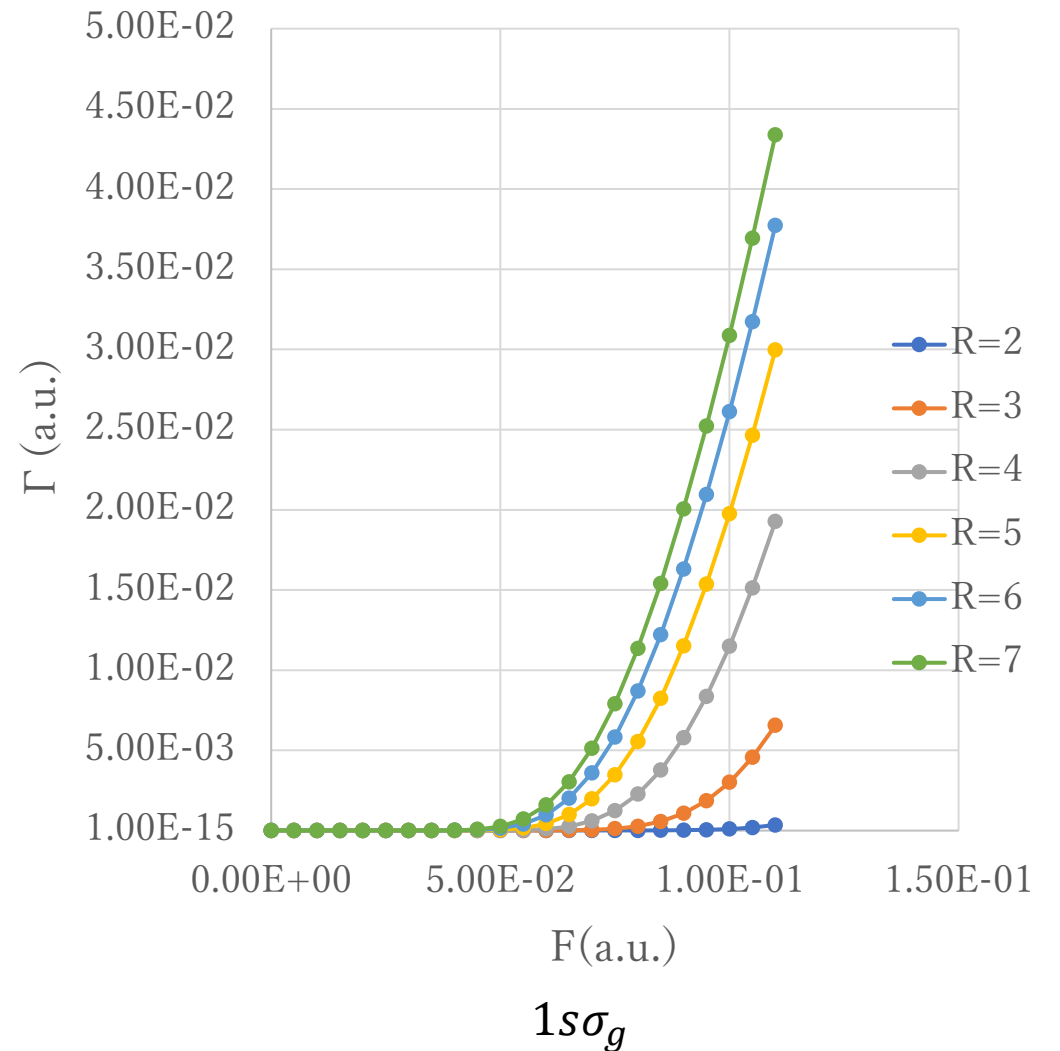
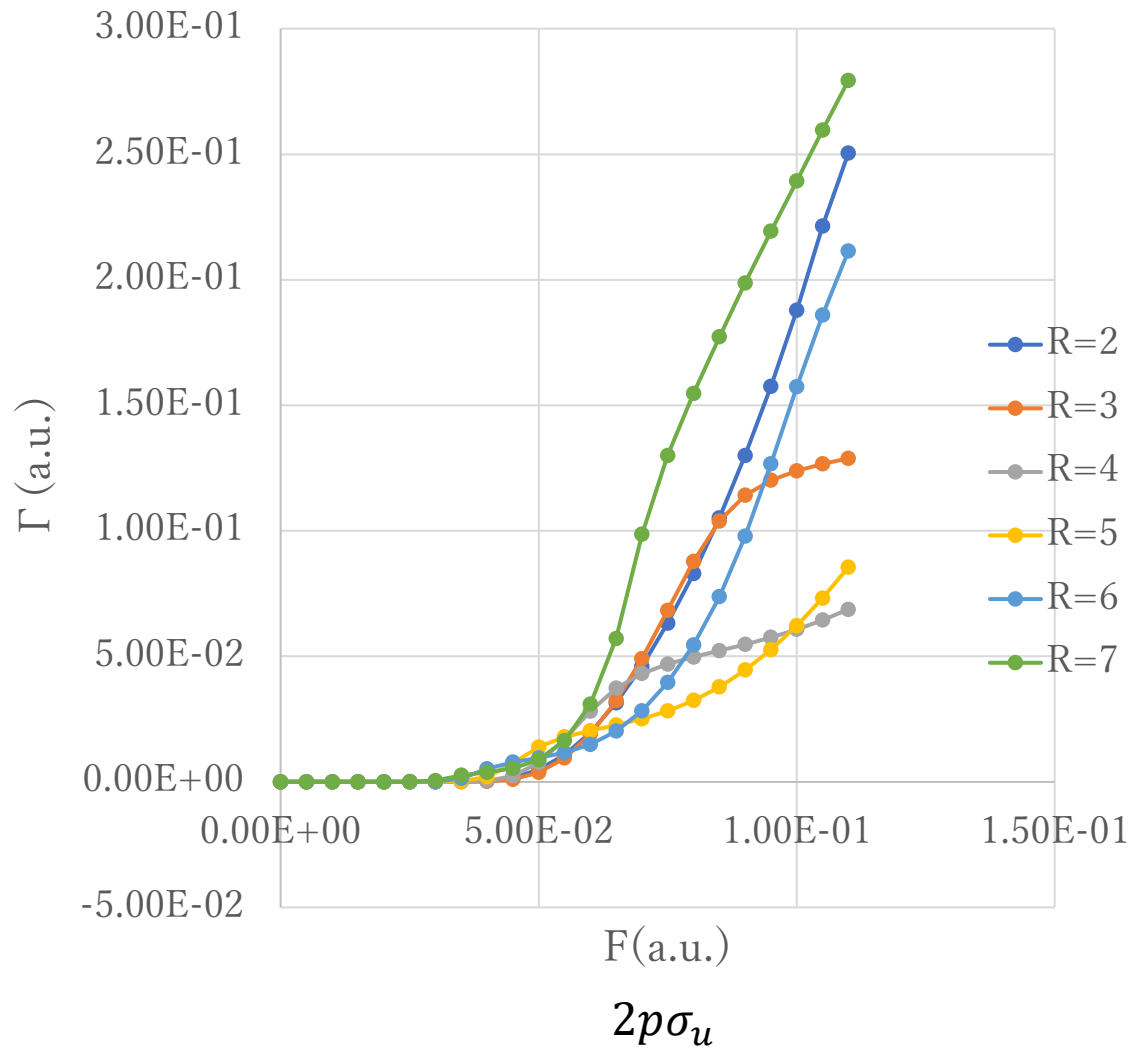
$1s\sigma_g$

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

計算結果 (E と電場の大きさの関係性)



核間距離Rごとのエネルギー実数部分 ϵ と与えた電場の大きさFの関係性



核間距離Rごとによるエネルギー虚数部分 Γ と与えた電場の大きさ F の関係性

結論

- H_2^+ の複素エネルギー準位をシーガート法で計算し、計算が不安定になる核間距離の大きな範囲でも3次元領域における一般的な配向角を扱うプログラムが動作することを確認した。
- 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運用できることを先行研究[1]との比較実験から確かめた。

おわり

・参考文献

[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).