

令和4年度 修士論文
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

基盤理工学専攻 森下研究室
濱川 悠真

2023年2月7日

目次

第 1 章	序論	2
1.1	トンネルイオン化と再散乱現象	2
1.2	焦線	4
1.3	二色偏光電場	5
第 2 章	理論	6
2.1	トンネルイオン化と電子の運動	6
2.2	再散乱条件と最終運動量	7
2.3	再散乱電子波束と光電子運動量分布	11
第 3 章	計算手法	12
第 4 章	研究課題 1	
	焦線の計算	13
4.1	単色直線偏光	13
4.2	二色直線偏光	16
第 5 章	研究課題 2	
	二色偏光電場パラメータと焦線の関係	18
5.1	計算条件	18
5.2	計算結果とその考察	19
第 6 章	研究課題 3	
	光電子運動量分布の計算	21
6.1	単色直線偏光	21
第 7 章	結論	24
	参考文献	26

第 1 章

序論

原子に高強度のレーザーを照射するとトンネル効果によりイオン化が起こる。イオン化により放出された電子の位置・運動量を観測することで物質の構造や特性といった情報を間接的に可視化する研究が行われている。実験ないし試行的シミュレーション [1] により導かれている結果を、理論を用いて説明することが本研究の最終的なねらいである。

1.1 トンネルイオン化と再散乱現象

原子や分子に 10^{14}W/cm^2 程度のレーザーを照射すると、レーザーは時間変化する強力な電場であるから原子周辺のクーロンポテンシャルはレーザー電場によって大きく歪められる。電子は原子核によるクーロンポテンシャルに束縛されているが、レーザー電場によりその障壁が薄くなるとトンネル効果により障壁を通過して原子核から離れる。これをトンネルイオン化とよぶ。トンネルイオン化により放出された電子は負の電荷を持つためレーザー電場から逆向きの力を受けて古典力学的に運動する。初期状態 (イオン化時刻) によって電子は様々な軌道をとるが、その内には元の位置に戻ってきて原子に再衝突するものがある。再衝突した電子はエネルギーを光子として放出し再びイオンと結合する再結合・高次高調波発生や弾性衝突し再び原子から離れていく再散乱といった現象を引き起こす。以上のトンネルイオン化～運動～再衝突の三段階からなる一連のプロセスは 3 ステップモデルと呼ばれている。

本研究では再衝突で起こる現象のうち再散乱に着目した.3ステップモデルは半古典的な近似によるものであり,イオン化により放出された直後の初期状態を与えれば古典力学的な計算により電子の運動を再散乱を経て最終状態まで追跡することが可能である.初期状態に対応する最終状態を得られるということは逆に再散乱電子の最終状態における運動量と散乱角を観測すれば遡って初期状態を決定することができることを意味しており,放出された電子の初期状態は原子や分子の構造によって変化することから,再散乱電子を観測することでターゲットとなる物質の構造に関する情報を得ることができる.

物質の構造解析にトンネルイオン化による光電子の再散乱現象を用いる最大の利点は高い時間分解能である.レーザーの周期はフェムト(10^{-15})秒のオーダーであるが,再散乱電子の運動状態はレーザーの位相も含んでいる.1周期中のうちさらにどの時点で放出された電子かを決定することが可能ならば時間分解能はさらに小さいアト秒の領域となり,原子・分子中の電子の状態変化といった超短時間の現象を捉えることも可能となる.しかし,レーザーのパラメータによっても変化する再散乱電子の運動状態と物質構造の関係性を調べるために大規模な実験を繰り返すことは容易ではない.理論とそれに基づく計算を用いて実験結果を再現することができれば実験結果の予測や目的を達成するためのパラメータの決定に役立てることができる.これは実用的な側面を見た本研究の最終目的の1つである.

1.2 焦線

3ステップモデルのうち2つ目のレーザー電場による電子の運動について, 再衝突時の運動量が等しくなる軌道 (trajectory) が複数存在する.

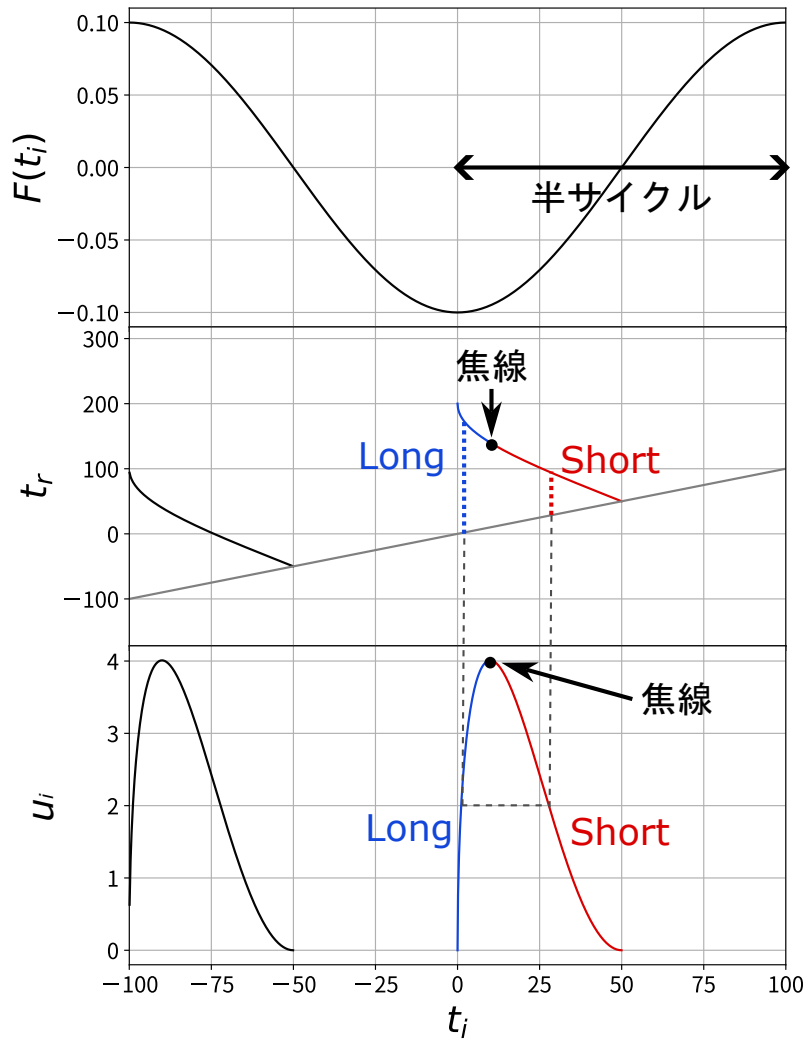


図 1.1: イオン化時刻 t_i に対する電場 $F(t_i)$, イオン化時刻 t_r と再衝突時の運動量 u_i

上図は電場 $F = -\cos(2\pi t/100)$ を例としてイオン化時刻に対する再散乱時刻と再衝突時の運動量を計算したものである。 $u_i = 2.0$ となるような (t_i, t_r) の組が半サイクル中に2組存在している. 中段の図において青と赤の点線はイオン化 (灰色線) から再衝突 (曲線) までに要する時間を表し, 青い領域ではイオン化から再衝突までが長く (Long Trajectory), 赤い領域では短く (Short Trajectory) になっている. 2つの領域の境界 (黒点) では再衝突時の運動量が極大値をとり, 軌道も1つに定まる.

最終運動量は再衝突時の運動量と散乱角によって決定されるため, Trajectory が重なる点について最終運動量を求めると曲線が描かれる. これを焦線 (Caustics) と呼ぶ. 特に, 散乱角 $\pi/2 \sim \pi$ の領域 (後方再散乱) における焦線 (Back Rescattering Caustics, BRC) は再散乱電子波束や光電子運動量分布の計算に用いられ, 量子力学的手法による計算で得られたデータとの比較・物質構造の情報を得るために重要なものである. 本研究では, 二色直線偏光電場を対象として焦線を計算し, それを用いて水素原子の光電子運動量分布を計算した.[2]

1.3 二色偏光電場

再散乱に関する先行研究では単色電場を対象として計算を行っていた [2] が, 本研究ではより複雑に変化する二色偏光電場を対象として計算を行った.

二色偏光電場は角振動数の異なる 2 つの電場を合成して得られる電場である. 電子の軌道は単色の電場の場合よりもより複雑となり [5], 最終運動量の極大値も複数存在する. これは焦線が複数存在することを意味し, 振幅比・位相差のパラメータによって様々に変化する. 焦線がちょうど 1 つに重なるようなパラメータを決定すれば, その点においては焦線を単色電場の場合と同様に扱うことができると考えられる.

第 2 章

理論

2.1 トンネルイオン化と電子の運動

トンネルイオン化により放出された電子は負の電荷を持つためレーザーによる振動電場から受けるクーロン力により電場と逆向きに運動する. この際、原子核と電子の間にはたらくクーロン力は電場によるクーロン力よりも十分に小さいため無視することができる. 加速度を $\dot{\mathbf{v}}$, レーザー電場を \mathbf{F} とすれば, 点電荷と電場のクーロン力の関係から運動は以下のような単純な運動方程式で記述することができる.

$$m\dot{\mathbf{v}} = -q\mathbf{F} \quad (2.1.1)$$

電子を原子単位で電荷 1・質量 1 の点電荷とみなせば

$$\dot{\mathbf{v}} = -\mathbf{F} \quad (2.1.2)$$

また, 位置について

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} \quad (2.1.3)$$

運動方程式 (2.1.2),(2.1.3) を連立させ, 電場と初期条件を与え数値的に解くことで電子の位置と運動量を調べることができる.

2.2 再散乱条件と最終運動量

トンネルイオン化により放出された電子が再び元の位置に戻り再散乱を起こす場合を考える。再散乱するためのイオン化時刻-再散乱時刻の条件を満たす電子について初期運動量・再散乱直前の運動量が一意に定まる。再散乱直前の運動量と再散乱角度を与えれば最終運動量が計算できるため、再散乱電子の挙動をイオン化時から再散乱後まで追うこと、最終運動量と角度からイオン化時の状態を逆算することが可能となる。

先行研究 [6] では $t \rightarrow -\infty$ で $\mathbf{F} = 0$ となる電場について再散乱条件を導出していたが、本研究ではより一般的な電場を扱い、任意の基準時刻 t_g において $\mathbf{F}(t_g) = F_g$ である場合について考える。運動方程式 (2.1.2),(2.1.3) を初期条件 $\mathbf{v}(t_g) = 0, \mathbf{r}(t_g) = 0$ のもとで解く。

$$\mathbf{v}(t) = - \int_{t_g}^t \mathbf{F}(t') dt' \quad (2.2.1)$$

$$\mathbf{r}(t) = \int_{t_g}^t \mathbf{v}(t') dt' = - \int_{t_g}^t \int_{t_g}^{t'} \mathbf{F}(t'') dt'' dt' \quad (2.2.2)$$

イオン化時刻 t_i における運動量・位置をそれぞれ $\mathbf{u}_i, \mathbf{q}_i$ とすれば、再散乱時刻 t_r における運動量・位置 $\mathbf{u}_f, \mathbf{q}_f$ は

$$\mathbf{u}_f = [\mathbf{u}_i - \mathbf{v}(t_i)] + \mathbf{v}(t_r) \quad (2.2.3)$$

$$\mathbf{q}_f = [\mathbf{q}_i - \mathbf{r}(t_i)] + [\mathbf{u}_i - \mathbf{v}(t_i)] (t_r - t_i) + \mathbf{r}(t_r) \quad (2.2.4)$$

従って

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_f - \mathbf{q}_i &= [\mathbf{q}_i - \mathbf{r}(t_i)] + [\mathbf{u}_i - \mathbf{v}(t_i)] (t_r - t_i) + \mathbf{r}(t_r) - \mathbf{q}_i \\ \frac{\mathbf{q}_f - \mathbf{q}_i}{t_r - t_i} &= \frac{\mathbf{r}(t_r) - \mathbf{r}(t_i)}{t_r - t_i} + [\mathbf{u}_i - \mathbf{v}(t_i)] \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

ここで、再散乱するための条件として再散乱時刻での位置 \mathbf{q}_r がイオン化時刻での位置 \mathbf{q}_i と同じになるとすれば

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\mathbf{r}(t_r) - \mathbf{r}(t_i)}{t_r - t_i} + [\mathbf{u}_i - \mathbf{v}(t_i)] \\ \therefore \mathbf{u}_i &= \mathbf{v}(t_i) - \frac{1}{t_r - t_i} [\mathbf{r}(t_r) - \mathbf{r}(t_i)] \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

同様にして、再散乱時刻における運動量は

$$\mathbf{u}_f = \mathbf{v}(t_r) - \frac{1}{t_r - t_i} [\mathbf{r}(t_r) - \mathbf{r}(t_i)] \quad (2.2.7)$$

(2.2.1),(2.2.2) から

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i &= - \int_{t_g}^{t_i} \mathbf{F}(t') dt' - \frac{1}{t_r - t_i} \left[- \int_{t_g}^{t_r} \int_{t_g}^{t'} \mathbf{F}(t'') dt'' dt' + \int_{t_g}^{t_i} \int_{t_g}^{t'} \mathbf{F}(t'') dt'' dt' \right] \\ &= - \int_{t_g}^{t_i} \mathbf{F}(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \int_{t_i}^{t_r} \int_{t_g}^{t'} \mathbf{F}(t'') dt'' dt' \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

ここで基準時刻を t'_g に変えると

$$\mathbf{u}_i = - \int_{t'_g}^{t_i} \mathbf{F}(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \int_{t_i}^{t_r} \int_{t'_g}^{t'} \mathbf{F}(t'') dt'' dt' \quad (2.2.9)$$

$$\begin{aligned} &= - \int_{t_g}^{t_i} \mathbf{F}(t') dt' - \int_{t'_g}^{t_g} \mathbf{F}(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \int_{t_i}^{t_r} \left[\int_{t_g}^{t'} \mathbf{F}(t'') dt'' + \int_{t'_g}^{t_g} \mathbf{F}(t'') dt'' \right] dt' \\ &= - \int_{t_g}^{t_i} \mathbf{F}(t') dt' - \int_{t'_g}^{t_g} \mathbf{F}(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \left[\int_{t_i}^{t_r} \int_{t_g}^{t'} \mathbf{F}(t'') dt'' dt' + (t_r - t_i) \int_{t'_g}^{t_g} \mathbf{F}(t'') dt'' \right] \\ &= - \int_{t_g}^{t_i} \mathbf{F}(t') dt' - \int_{t'_g}^{t_g} \mathbf{F}(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \int_{t_i}^{t_r} \int_{t_g}^{t'} \mathbf{F}(t'') dt'' dt' + \int_{t'_g}^{t_g} \mathbf{F}(t'') dt'' \\ &= - \int_{t_g}^{t_i} \mathbf{F}(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \int_{t_i}^{t_r} \int_{t_g}^{t'} \mathbf{F}(t'') dt'' dt' \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

(2.2.8) と (2.2.10) が等しくなり, 運動量は基準時刻 t_g によらないことが確かめられた.

断熱理論から, イオン化時刻において電子は電場と垂直な方向にのみ運動量を持つ. 従って電場方向の単位ベクトルを \mathbf{e}_i とすれば

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_i = 0 \quad (2.2.11)$$

(2.2.1),(2.2.2),(2.2.6) から

$$\begin{aligned} &e_x \left[- \int_{t_g}^{t_i} F_x(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \int_{t_i}^{t_r} \int_{t_g}^{t'} F_x(t'') dt'' dt' \right] \\ &+ e_y \left[- \int_{t_g}^{t_i} F_y(t') dt' + \frac{1}{t_r - t_i} \int_{t_i}^{t_r} \int_{t_g}^{t'} F_y(t'') dt'' dt' \right] = 0 \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

運動量が基準時刻 t_g に依存しないことから再散乱条件式も基準時刻 t_g に依存せず, イオン化時刻 t_i と再散乱時刻 t_r のみで決まる.

以下、電場が1次元 ($F_y = 0$) の場合を考える。
 散乱角 θ で散乱した後の $t = \infty$ における最終運動量 \mathbf{k} を考える。再散乱直後の運動量を \mathbf{u}'_f とすれば、

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \mathbf{u}'_f + [v_\infty - v(t_r)]\mathbf{e}_z \\ \rightarrow \mathbf{u}'_f(t_r, \mathbf{k}) &= \mathbf{k} - [v_\infty - v(t_r)]\mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

また、

$$k_\perp = |\mathbf{u}'_f| \sin \theta \quad (2.2.14)$$

$$k_z = |\mathbf{u}'_f| \cos(\theta) + v_\infty - v(t_r) \quad (2.2.15)$$

これをベクトルを用いて表したものが下図である。

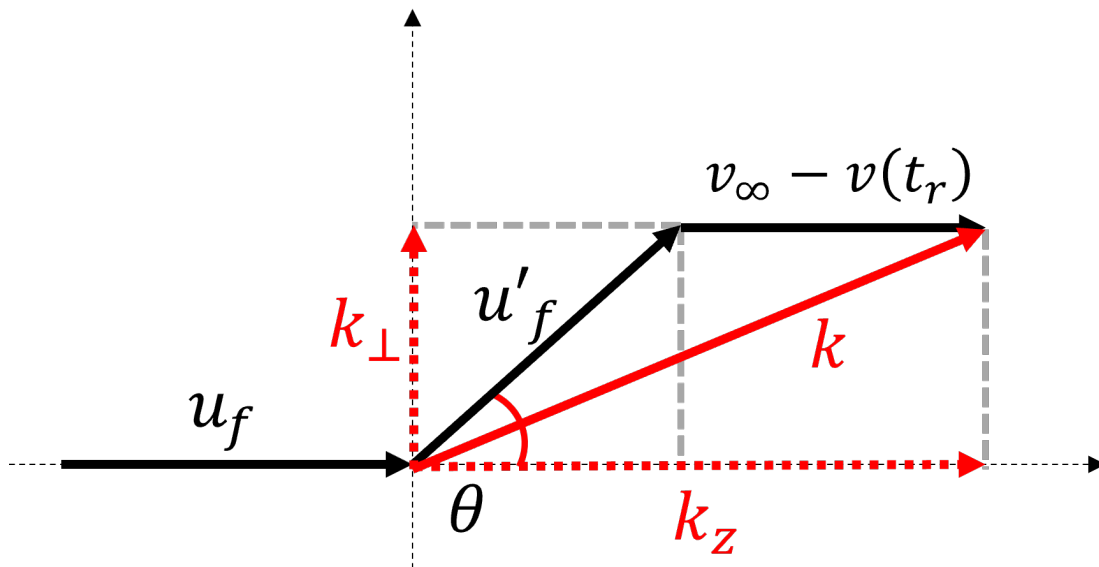


図 2.1: 再衝突前後の運動量 u_f, u'_f , 散乱角 θ と最終運動量 k の関係

本研究では弾性散乱の場合のみを扱うこととする. 衝突前後でエネルギー保存則が成り立つので

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}u_f^2(t_i, t_r) &= \frac{1}{2}u_f'^2(t_r, \mathbf{k}) \\ \rightarrow \frac{\partial}{\partial t_r}u_f^2(t_i, t_r) - \frac{\partial}{\partial t_r}u_f'^2(t_r, \mathbf{k}) &= 0\end{aligned}\quad (2.2.16)$$

(2.2.7) から

$$\begin{aligned}2\mathbf{u}_f(t_i, t_r)\frac{\partial}{\partial t_r}\mathbf{u}_f(t_i, t_r) - 2\mathbf{u}_f'\frac{\partial}{\partial t_r}\mathbf{u}_f'(t_r, \mathbf{k}) &= 0 \\ \mathbf{u}_f(t_i, t_r)\frac{\partial}{\partial t_r}\left[\mathbf{v}(t_r) - \frac{\mathbf{r}(t_r) - \mathbf{r}(t_i)}{t_r - t_i}\right] - \mathbf{u}_f'\frac{\partial}{\partial t_r}\{\mathbf{k} - [v_\infty - v(t_r)]\mathbf{e}_z\} &= 0\end{aligned}\quad (2.2.17)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_f(t_i, t_r)\frac{\partial}{\partial t_r}\left[-F_x(t_r)\mathbf{e}_z - \frac{\mathbf{r}(t_r) - \mathbf{r}(t_i)}{t_r - t_i}\right] - \mathbf{u}_f'\frac{\partial}{\partial t_r}\{\mathbf{k} - F_x(t_r)\mathbf{e}_z\} &= 0 \\ \left[u_f' - u_f\right]F_x(t_r)\mathbf{e}_z - \frac{\mathbf{u}_f^2}{t_r - t_i} &= u_f'\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t_r} \\ [\cos(\theta) - 1]F_x(t_r)\mathbf{e}_z - \frac{\mathbf{u}_f}{t_r - t_i} &= \cos(\theta)\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t_r}\end{aligned}$$

最終運動量が極値を取る条件は $\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t_r} = 0$ から

$$G(t_i, t_r, \theta) = [\cos(\theta) - 1]F_x(t_r)\mathbf{e}_z - \frac{\mathbf{u}_f}{t_r - t_i} = 0 \quad (2.2.18)$$

(2.2.12) の再散乱条件式とこの最終運動量極大極小の条件式から, 任意の散乱角 θ に対して最終運動量が極値をとるような t_i, t_r, \mathbf{k} を決定することができる. (k_z, k_{perp}) を 2次元平面上にプロットすることで焦線を得ることができる.

二色偏光の場合には \mathbf{k} が極値を取る (t_i, t_r) が複数存在するため焦線も複数存在する. 振幅比と位相差のパラメータを変えて繰り返し計算を行うことでそれらの焦線が 1 つに重なるような点を見つけることができる. この点においては最終運動量の極大・極小値が最終運動量の最大・最小値に等しくなるため単色電場の場合同様に取り扱うことが可能となる.

2.3 再散乱電子波束と光電子運動量分布

焦線は $k_z - k_\perp$ 平面上の曲線として表されており, 焦線の法線ベクトル $\mathbf{v}(\theta)$ と大きさ Δk を用いて次式のような直交座標 (k_z, k_\perp) を曲線座標 $(\theta, \Delta k)$ に変換することができる.

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}(\theta) + \Delta k \mathbf{v}(\theta) \quad (2.3.1)$$

先行研究 [2] より, 光電子運動量分布は以下の式で表される微分散乱断面積と再散乱電子波束の積によって計算できることがわかっている.

$$P_c(\mathbf{k}) = |f(\mathbf{u}_f, \Omega)|^2 W(\theta, \Delta k) \quad (2.3.2)$$

本研究で対象としている水素原子においては, 微分散乱断面積 $|f(\mathbf{u}_f, \Omega)|^2$ はラザフォード散乱において

$Z_1 = Z_2 = 1, e = 1, E = \frac{1}{2}\mu u_f^2, \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{1836}{1837}$ として

$$|f(\mathbf{u}_f, \Omega)|^2 = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{1}{2\pi \frac{1836}{1837} u_f^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (2.3.3)$$

再散乱電子波束 W は

$$W(\theta, \Delta k) = |\text{Ai}(\alpha(\theta)[\Delta k - q(\theta)])|^2 \left| \frac{2}{S_r'''(\theta)} \right|^{\frac{2}{3}} \frac{4\pi^2 |A_0(t_i)|^2}{(t_r - t_i)^3 |F(t_i)|} \exp \left[- \int_{-\infty}^{t_i} \Gamma_0(t) dt \right] \quad (2.3.4)$$

ここで Ai は第一種 Airy 関数である. 各係数については,

$$\begin{aligned} q(\theta) &= \frac{-E_0(t_i)}{(t_r - t_i)|F(t_i)|} \\ \alpha(\theta) &= \left(\frac{2}{S_r'''(\theta)} \right)^{\frac{1}{3}} |u_f| \\ S_r'''(\theta) &= u_f \left[2\dot{F}(t_r) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) - \frac{3F(t_r)}{t_r - t_i} - \frac{3u_f}{(t_r - t_i)^2} - \frac{u_f^2}{(t_r - t_i)^3 F(t_i)} \right] \\ |A_0(t)|^2 &= \frac{4\pi\sqrt{2|E_0|}\Gamma_0(t)}{|F(t)|} \\ E_0(t) &= \mathcal{E}_0(t) - \frac{i}{2}\Gamma_0(t) \quad \dots \text{エネルギー固有値} \\ \mathcal{E}_0 &= -0.485483 \text{ a.u.} \quad \dots \text{水素原子のイオン化エネルギー} \\ \Gamma_0(t) &= \frac{4}{F(t)} \exp \left(-\frac{2}{3F(t)} \right) \quad \dots \text{水素原子のイオン化レート} \end{aligned}$$

第 3 章

計算手法

本研究で用いたレーザー電場は以下の式で表される.

$$F(t) = -F_0 \left[\cos\left(\frac{4\pi t}{T}\right) + r \cos\left(\frac{8\pi t}{T} + \delta\right) \right] \exp\left[-\left(\frac{2t}{T}\right)^2\right] \quad (3.0.1)$$

2 サイクルの直線偏光レーザー電場で, 角振動数比は 1:2 である.($r = 0$ の時に単色偏光となる.) また計算の手法として, 数値積分計算には 2 次のニュートンコーツの公式 (シンプソン則)

$$\int_a^b f(t') dt' = \sum_{k=1}^{\frac{a-b}{h}} \int_{a+h(k-1)}^{a+hk} f(t') dt' = \sum_{k=1}^{\frac{a-b}{h}} \frac{f(a+h(k-1)) + 4f(a+h(k-\frac{1}{2})) + f(a+hk)}{6} h \quad (3.0.2)$$

数値微分計算には差分法

$$f'(t) = \frac{f(t-2.5h) - 9f(t-1.5h) + 45f(t-0.5h) + 45f(t+0.5h) + 9f(t+1.5h) - f(t+2.5h)}{60h} + O(h^6) \quad (3.0.3)$$

を, 再散乱条件式及び最終運動量の条件式の求解には二分法を用いた.

第 4 章

研究課題 1

焦線の計算

本章では, 単色直線偏光及び二色直線偏光について散乱角を変えて再散乱時刻・最終運動量を計算し再衝突方向の運動量 k_z とそれに垂直な運動量 k_{\perp} を縦横軸とした平面上にプロットすることで焦線を求めた.

4.1 単色直線偏光

4.1.1 計算条件

計算に用いた電場パラメータは単色直線偏光で $F_0 = 0.1$, $T = 200$, $r = 0$, $\delta = 0$ であり, 電場の時間変化は以下のグラフの通り.

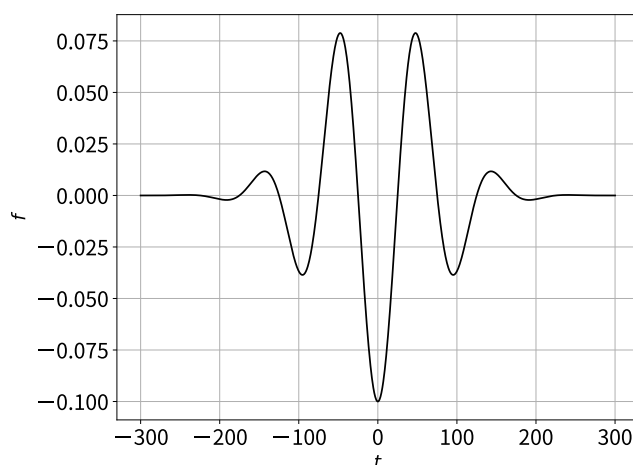


図 4.1: 単色直線偏光のイオン化時刻 t_i に対する電場 $F(t_i)$ の変化

4.1.2 計算結果

イオン化時刻 t_i と散乱角 $\theta = 180^\circ$ の時の最終運動量 k は以下の図のようになった。

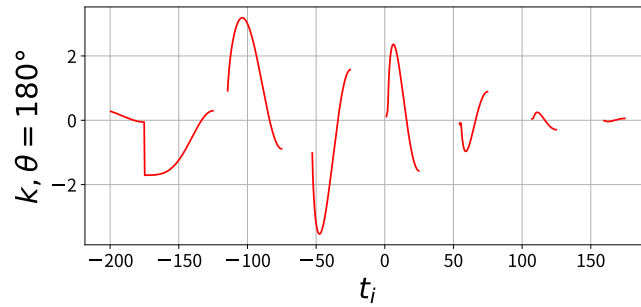


図 4.2: 単色直線偏光のイオン化時刻 t_i に対する散乱角 $\theta = 180^\circ$ の時の最終運動量

この中で最終運動量の極値の大きさが最も大きくなるような領域を対象として焦線を計算することとした。ここでは $t = -60 \sim -20$ の範囲を選び、改めて計算した結果次の図のようになった。

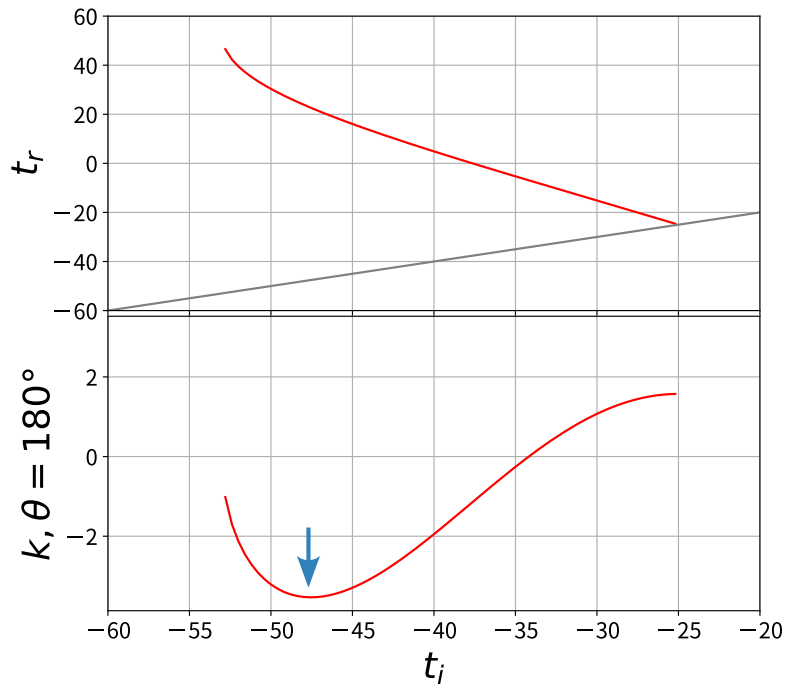


図 4.3: 単色直線偏光のイオン化時刻 t_i に対する再散乱時刻, 散乱角 $\theta = 180^\circ$ の時の最終運動量

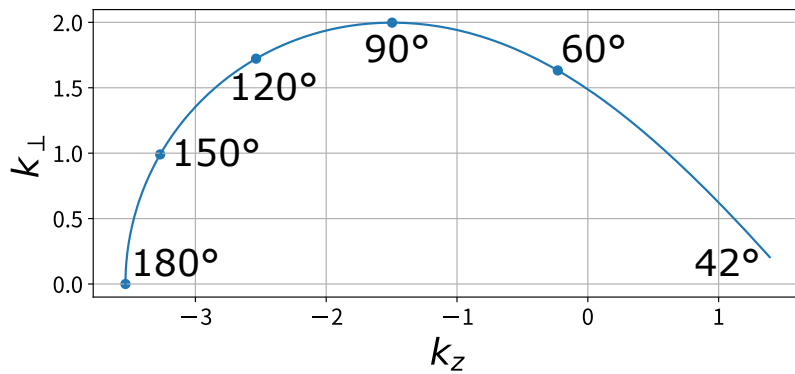


図 4.4: 単色直線偏光の焦線

$t_i - k$ グラフの青矢印は最終運動量が極大値を取る点を示しており、 $k_z - k_{\perp}$ グラフの 180° の点に対応している。これは先行研究 [2] の結果を再現しており、焦線の計算が正しく行われていることが確認された。

4.2 二色直線偏光

4.2.1 計算条件

計算に用いた電場パラメータは二色直線偏光で $F_0 = 0.1$, $T = 200$, $r = 0.9$, $\delta = \pi$ であり, 電場の時間変化は以下のグラフの通り.

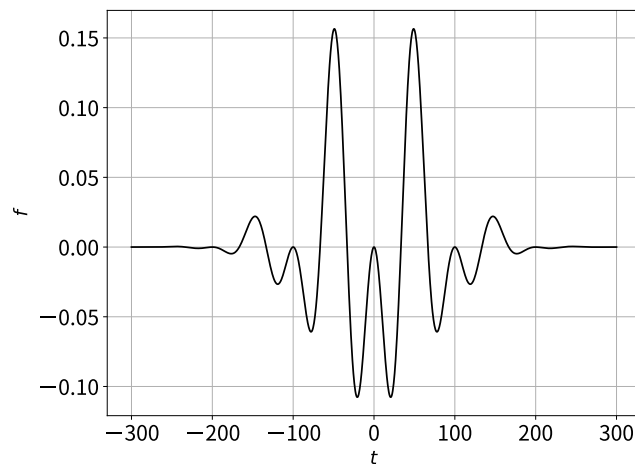


図 4.5: 二色直線偏光のイオン化時刻 t_i に対する電場 $F(t_i)$ の変化

4.2.2 計算結果とその考察

イオン化時刻 t_i と散乱角 $\theta = 180^\circ$ の時の最終運動量 k は以下の図のようになった.

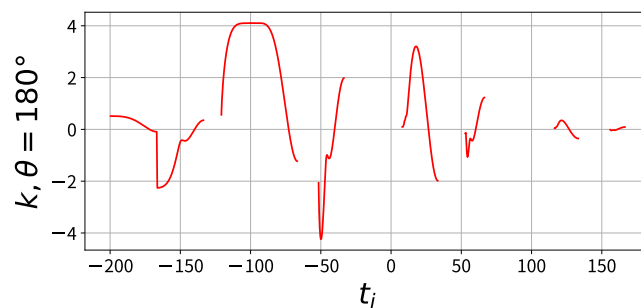


図 4.6: 二色直線偏光のイオン化時刻 t_i に対する散乱角 $\theta = 180^\circ$ の時の最終運動量

この中で最終運動量の極値の大きさが最も大きくなるような領域を対象として焦線を計算することとした. ここでは $t = -60 \sim -20$ の範囲を選び, 改めて計算した結果次の図のようになった.

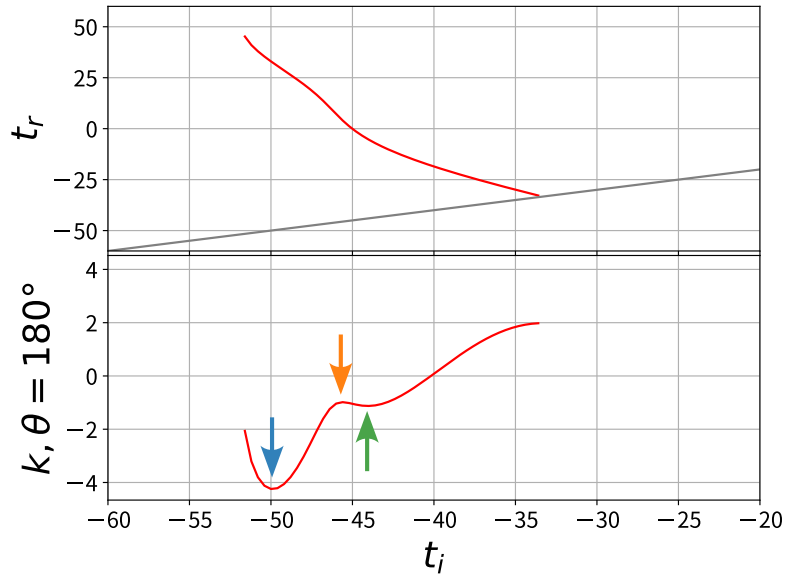


図 4.7: 二色直線偏光のイオン化時刻 t_i に対する再散乱時刻, 散乱角 $\theta = 180^\circ$ の時の最終運動量

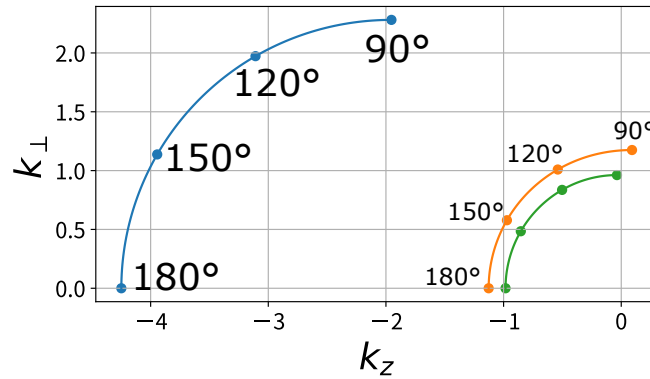


図 4.8: 二色直線偏光の焦線

$t_i - k$ グラフの青, 橙, 緑の 3 つの矢印は最終運動量が極値を取る点を示しており, $k_z - k_\perp$ グラフの各色の 180° の点に対応している. 二色直線偏光の場合に電場のパラメータ振幅比 r , 位相差 δ によって焦線が複数現れることが確かめられた.

第 5 章

研究課題 2

二色偏光電場パラメータと焦線の関係

研究課題 1 では二色直線偏光の焦線が複数存在するという結果になった. 次に, 電場のパラメータを変化させた時に焦線の数はどう変化するかを調べた.

二色偏光について振幅比・位相差を変えて計算し, 振幅比 r , 位相差 δ , 最終運動量の大きさ k を 3 つの軸とする 3 次元上にプロットすることで焦線の数と最終運動量の大きさの変化を調べた.

5.1 計算条件

計算に用いた電場パラメータは二色直線偏光で $F_0 = 0.1$, $T = 200$ とし r, δ は可変. まず広い範囲で r, δ を変化させ, そこから計算範囲を狭めていき焦線が 1 つに重なるような (r, δ) の組を決定した.

5.2 計算結果とその考察

$0 \leq r \leq 1.0$, $0 \leq \delta \leq \pi$ の範囲で焦線を求めた結果は以下の図のようになった。

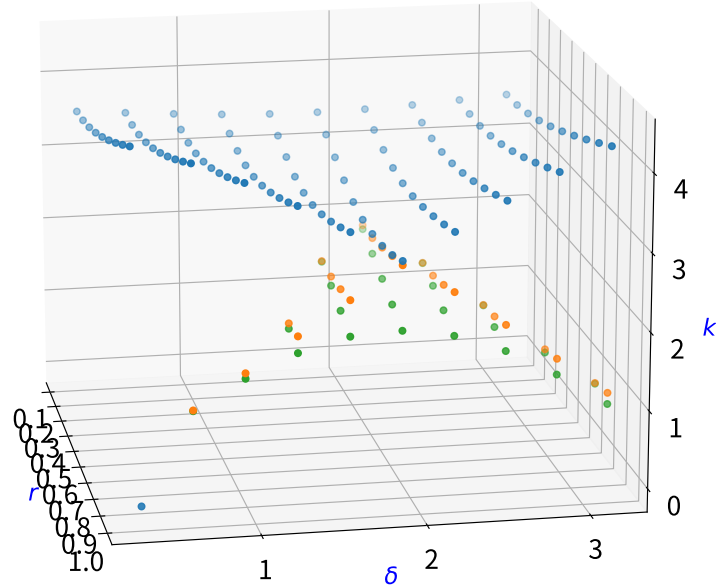


図 5.1: 二色直線偏光電場の振幅比 r , 位相差 δ に対する散乱角 $\theta = 180^\circ$ の時の最終運動量

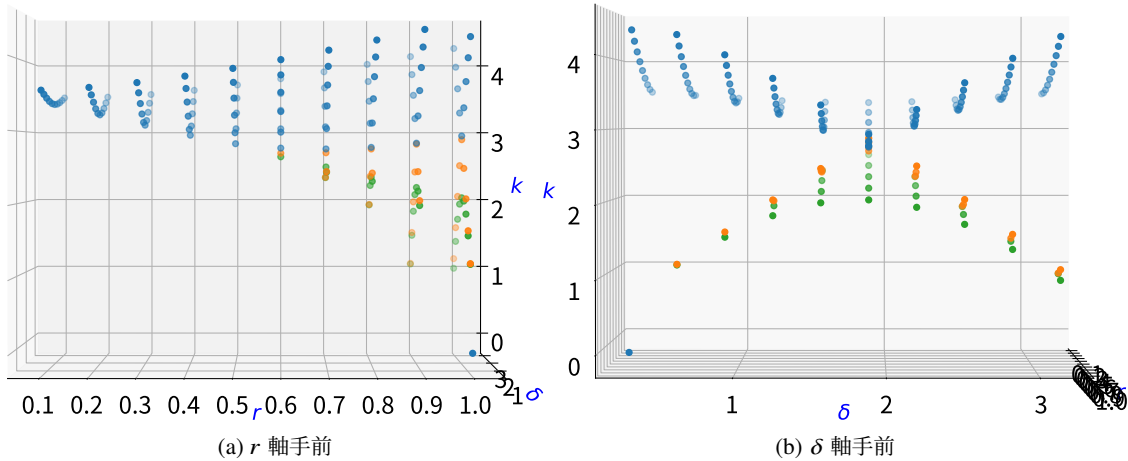


図 5.2: 図 5.1 の別視点 (軸に垂直な方向)

青・橙・緑の点はそれぞれ複数の焦線の存在を表している。最終運動量の分布は先行研究 [1] にもみられた三角形の燕尾状構造 (Swallowtail Structure) を示した。この構造の先端部分は $r = 0.6, \delta = 1.9$ 付近であり、ここが焦線が 1 つに収束する点であるからこの点に向けて r, δ の範囲を狭めながら調べていった。

その結果, 有効数字 4 桁で $r = 0.4748, \delta = 1.825$ と決定された. この時, 3 つの極値における最終運動量の値は $-2.834357, -2.834315, -2.834313$ となり小数点以下 5 桁まで一致した. 差は十分に小さく, この点において 3 つの焦線はちょうど重なっているといえる.

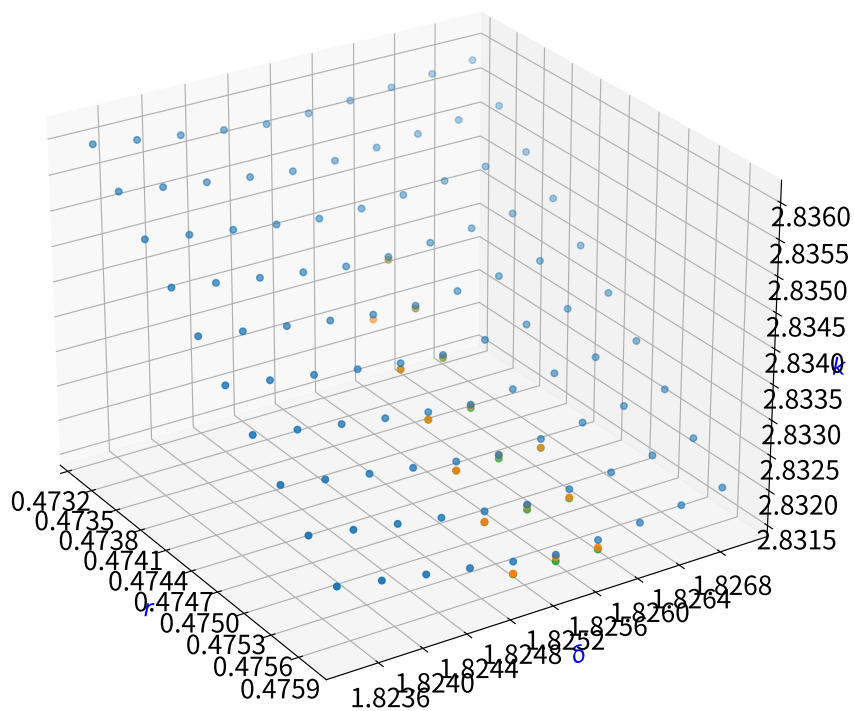


図 5.3: 焦線が重なる点の周辺における最終運動量

第 6 章

研究課題 3

光電子運動量分布の計算

単色直線偏光について水素原子の光電子運動量分布 $P_c(\Delta\mathbf{k})$ を計算した. 結果は $P_0 = P_c(0)$ に対する比 $P_c(\Delta\mathbf{k})/P_0$ で示した.

6.1 単色直線偏光

6.1.1 計算条件

計算に用いた電場パラメータは $F = 0.1, T = 140, 170, 200, r = 0, \delta = 0$ 及び $F = 0.2, T = 100, 120, 140, r = 0, \delta = 0$ であり, T を 3 通り, $\theta = 180^\circ, 150^\circ, 120^\circ, 90^\circ$ の 4 通りに変えて計算した.

6.1.2 計算結果とその考察

計算結果は次の図のようになった。

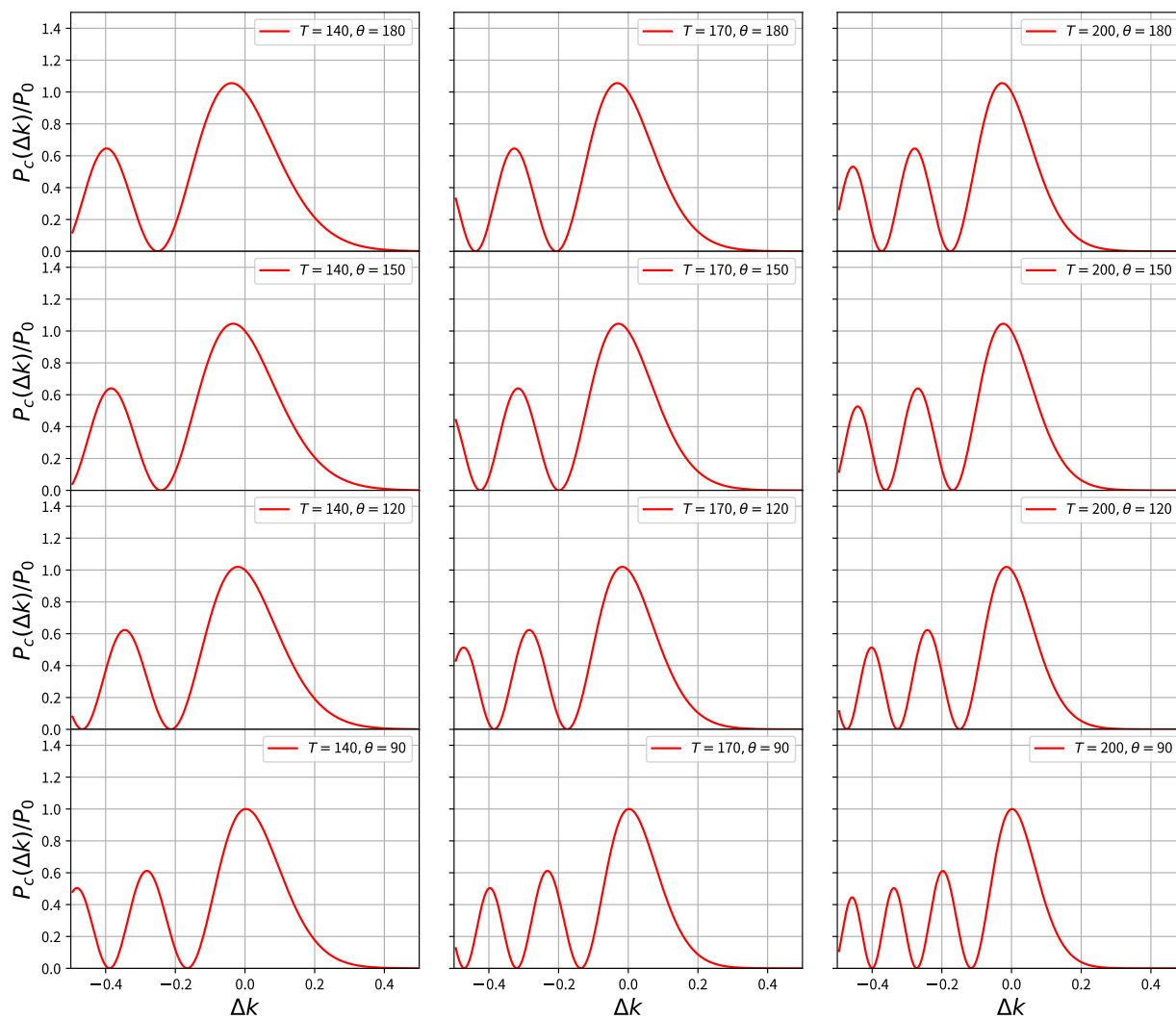


図 6.1: $F = 0.1$ の単色直線偏光における光電子運動量分布

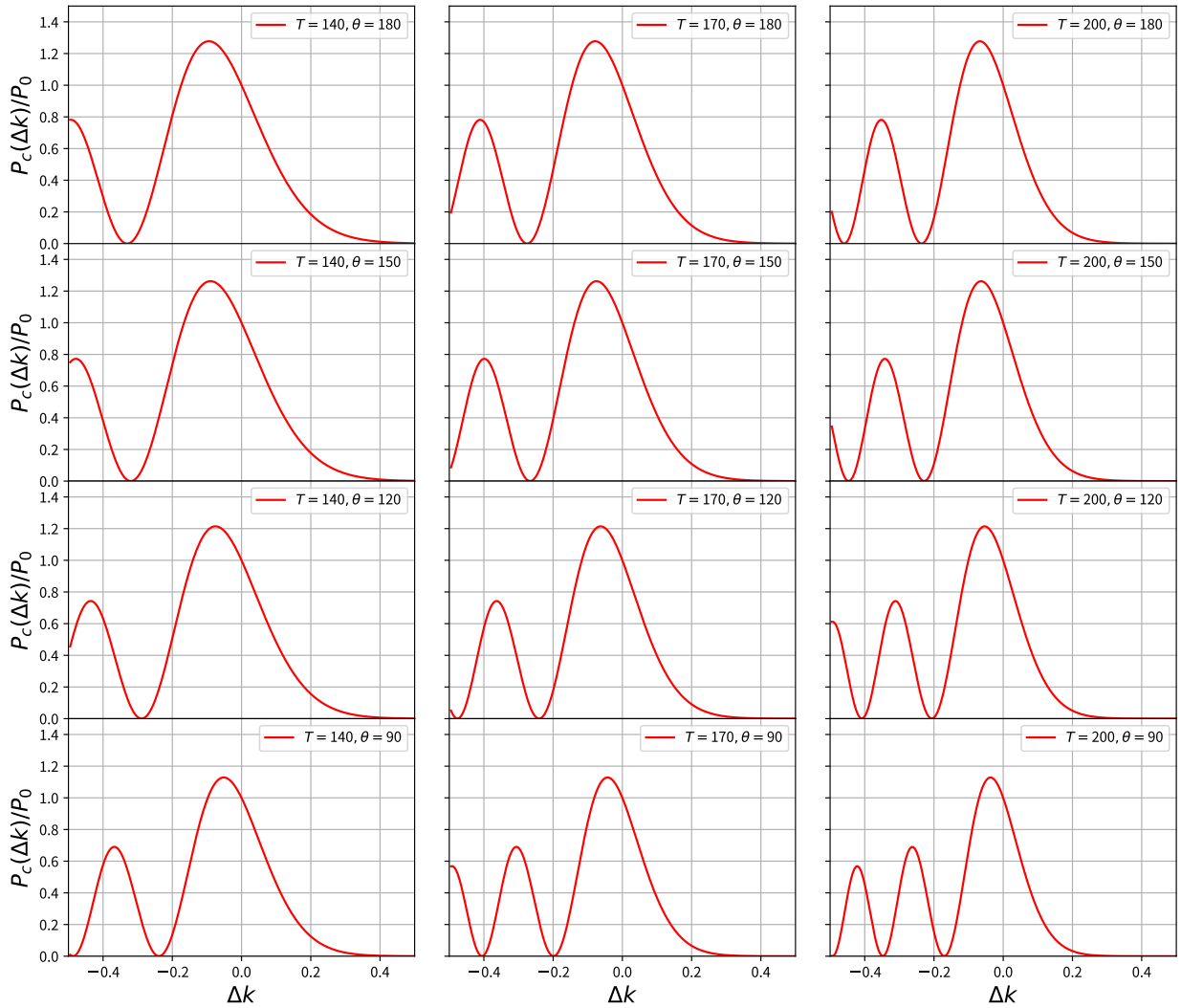


図 6.2: $F = 0.2$ の単色直線偏光における光電子運動量分布

どの条件においても光電子運動量分布のグラフは $\Delta k = 0.0$ 付近で最大値をとり、 Δk が小さくなるにつれ振動しそのピークは小さくなっていった。これは $k_z - k_\perp$ 平面上において光電子運動量分布が同心円状の構造をとることを示唆している。また、 T が小さくなれば振動の周期は長く、 θ が小さくなれば振動の周期は短くなるという傾向がみられた。これは 2.3 での定義から $t_r - t_i$ 及び $S'''(\theta)$ の変化による影響が大きいと考えられた。

これらの結果は先行研究 [2] の結果をよく再現しており、光電子運動量分布の計算が正しく行われていることを意味する。

第 7 章

結論

本研究ではトンネルイオン化により放出された電子に起こる現象のうち再散乱に着目し, 再散乱時刻・最終運動量を計算することで焦線を求めた. また, 先行研究で扱われなかった二色電場を用いた計算を行い, 焦線が 1 つに重なり合うような電場パラメータを決定した. そして, 量子力学的な計算結果との比較や物質構造の解析に重要である光電子運動量分布の計算を水素原子を対象として行った. その結果, 二色電場において焦線が複数現れることを計算により確かめ, 複数の焦線が 1 つに重なるような電場パラメータを求めることができた. 光電子運動量分布についても単色直線偏光の場合について計算できたが, 二色直線偏光についての計算及びその結果のもつ物理的意味の検討や量子力学的手法による計算結果との比較については本研究では達成することができなかった.

謝辞

本研究及び論文作成にあたり, 指導教員である森下亨教授には研究方針や手法, 基礎的な理論について終始丁寧なご指導を頂きました。また同研究室の播磨君, 小島君, 斎藤君には日頃から様々な助言をいただきました。ここに感謝の意を表します。

参考文献

- [1] Raz, Oren, et al. "Spectral caustics in attosecond science.", *Nature Photonics* 6.3 (2012): 170-173.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] 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
- [6] 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
- [7] 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
- [8] 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」
- [9] 牛島省(著), 「数値計算のための Fortran90/95 プログラミング入門」
- [10] 久保田光一(著), 「工学基礎 数値解析とその応用」