

修 士 論 文 の 和 文 要 旨

研究科・専攻	大学院 情報理工 学研究科 基盤理工学 専攻 博士前期課程		
氏 名	播磨貴大	学籍番号	2233078
論 文 題 目	σ 軌道および π 軌道を考慮した高強度レーザー場中の水素分子イオン解離の計算		
<p style="text-align: center;">要 旨</p> <p>高強度円偏光レーザーパルスの水素分子 (H_2) に照射するとレーザー照射によって水素分子はイオン化し水素分子イオン (H_2^+) となって、その後核間距離を増大させながら陽子 (H^+) と原子 (H) に解離する。この時 H_2^+ の電子が 2 個の陽子のどちらに局在して解離するのか、イオン化時の分子軸に対するレーザー場の位相と放出される陽子の運動エネルギーに依存性があることが実験的に見出された。これは H_2^+ の電子基底状態・第一励起状態である 2 つの σ 軌道のみを考慮した 2 準位系の計算によって再現された[1]。一方で、この実験[1]で用いられたレーザー強度 1.2×10^{14} W/cm² よりもレーザー強度が高い場合には、よりエネルギーの高い π 軌道への遷移確率が上昇し、解離に影響を与えるため σ 軌道のみでの 2 準位系では解離過程の記述が不十分になると考えられる。本研究は解離の分子軸に対するレーザー場の位相と陽子の放出エネルギーの依存性に対し上準位が与える影響を調べるため、σ 軌道の 2 準位に加えて π 軌道を含めた 4 準位を考慮した計算を行った。</p> <p>本稿では円偏光レーザー照射後 H_2 のイオン化時刻を $t = 0$ とし、H_2^+ の時間依存 Schrödinger 方程式を、4 準位系について Born-Oppenheimer 近似の下でスプリットオペレータ法を用い波動関数 $\Psi(\mathbf{r}, R, t)$ を展開し、動径波動関数について計算した。得られた波動関数をレーザー照射後 ($t \rightarrow \infty$) におけるエネルギー E の固有関数 $\phi_E^v(\mathbf{r}, R)$ に射影して解離エネルギーに依存する遷移振幅 $A_v(E) = \langle \Psi(\mathbf{r}, R, t \rightarrow \infty) \phi_E^v(\mathbf{r}, R) \rangle$ を求めた。ここで添え字 $v = 1, 2, 3, 4$ は無電場 H_2^+ の各準位の分子軌道 $1s\sigma_g, 2p\sigma_u, 2p\pi_u, 3d\pi_g$ に対応する。電子の左右の陽子への局在確率を、遷移振幅を用いて $P_l(E) = A_1(E) + A_2(E) ^2/2$, $P_r(E) = A_1(E) - A_2(E) ^2/2$, $P'_l(E) = A_3(E) + A_4(E) ^2/2$, $P'_r(E) = A_3(E) - A_4(E) ^2/2$ として定義することで以下の電子の局在パラメータ $\beta(E), \beta'(E)$ によってイオン化時の分子軸に対するレーザー場の位相と陽子の放出エネルギーの関係を計算した。</p> $\beta(E) = \frac{P_l(E) - P_r(E)}{P_l(E) + P_r(E)}, \quad \beta'(E) = \frac{P'_l(E) - P'_r(E)}{P'_l(E) + P'_r(E)} \quad (1)$ <p>2 準位系についても同様の計算をし、2 準位系と 4 準位系の計算結果の比較によって上準位の影響を調べた。実験[1]に近いレーザー強度 $\sim 8.8 \times 10^{13}$ W/cm² では $\beta(E)$ は 2 準位系の結果と一致するが、より高いレーザー強度では π 軌道の準位の存在確率が増大した。特にレーザー強度 $\sim 1.4 \times 10^{15}$ W/cm² における $\beta(E)$ は 2 準位系の計算結果とは大きく異なるエネルギー依存性が見出された。これにより高いレーザー強度における H_2^+ の解離を記述するためには、上準位のポテンシャルを考慮した計算が必要になることが明らかとなった。</p> <p>[参考文献] [1] J. Wu, et al., "Understanding the role of phase in chemical bond breaking with coincidence angular streaking", Nat. Commun. 4, 2177 (2013)</p>			