

氏 名

石田 優志

学籍番号

2010042

題 目

再衝突過程における電子衝撃による CO⁺の電子励起微分断面積の計算

要 旨

指導教員氏名

森下 亨

高強度レーザーを原子・分子に照射することで発現する電子の再衝突は、原子・分子内の電子の運動スケールであるアト秒スケールで行われる。また、電子の再衝突によって発生する標的分子イオンによる電子の散乱微分断面積を実験室上で精密に観測する手法が提案されており、この微分断面積は原子・分子のイメージングに用いられる。これまでの研究は主に弾性散乱について行われていたが、最近では非弾性散乱である再衝突過程での分子の励起について興味を持たれはじめています。

本研究では、CO⁺分子の電子状態の励起についての理論的研究を行った。運動量移行を K' として、分子イオンによる電子の励起微分断面積は散乱振幅 $F(K')$ の絶対値の2乗に比例する。この散乱振幅は一次ボルン近似を用いると、分子内のすべての電子の位置ベクトル r'_1, \dots, r'_N の多重積分の形をとる。

$$F(K') = -\frac{2}{|K'|^2} \int \dots \int \Psi_g^*(r'_1, \dots, r'_N) \sum_{s=1}^N e^{iK' \cdot r'_s} \Psi_e(r'_1, \dots, r'_N) dr'_1 \dots dr'_N \quad (1)$$

本研究では、CO⁺分子の電子配置 $\dots (1\pi)^4 (5\sigma)^1$ の基底状態 Ψ_g から電子配置 $\dots (1\pi)^3 (5\sigma)^1 (2\pi)^1$ の励起状態 Ψ_e への励起を考え、このとき励起する1つの電子に注目する。ここで、CO⁺波動関数 Ψ_g, Ψ_e のうち注目する電子の始状態と終状態の軌道 $1\pi, 2\pi$ をそれぞれ ψ_g, ψ_e とした。 ψ_g が実関数としたことから、注目する電子の位置ベクトル r' を用いて式(1)の散乱振幅を以下のように簡略化した。

$$F(K') = -\frac{2}{|K'|^2} \int \psi_g(r') \psi_e(r') e^{iK' \cdot r'} dr' \quad (2)$$

ここで、 ψ_g, ψ_e はガウス関数で展開されたものを用いた。この散乱振幅を波動関数 $\psi_g(r'), \psi_e(r')$ の式から解析的に解くことで求めた微分断面積と、式(1)の積分を数値積分によって求めた微分断面積を比較し、2つの結果が一致することを確認した。

次に、 $|F(K')|^2 = |F(-K')|^2$ より、CO⁺分子のC側から衝突させた散乱断面積とO側から衝突させた散乱断面積はボルン近似の下で一致する。これを数値的に確認した。

また、基底状態の波動関数の分子軸まわりの配向を γ_g 、励起状態の波動関数の分子軸まわりの配向を γ_e とする。 ψ_g, ψ_e はどちらも π 軌道である為、励起微分断面積は実験的には全ての γ_e, γ_g での微分断面積の平均で表される。そして、理論的にはこの微分断面積の平均は、 (γ_g, γ_e) がそれぞれ $(0, 0)$ 、 $(0, \frac{\pi}{2})$ 、 $(\frac{\pi}{2}, 0)$ 、 $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ である4つの微分断面積の平均で表せる。これを数値的に確認した。