

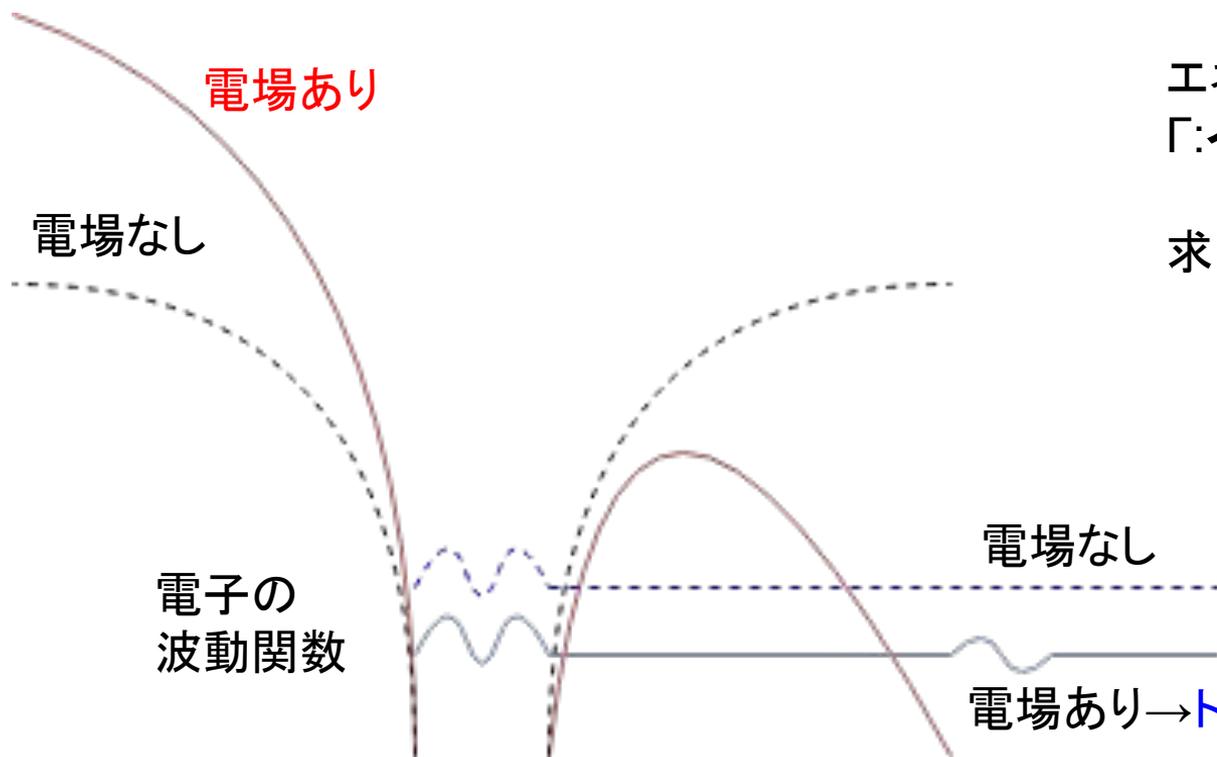
強電場中の水素分子イオン: π 状態のシーガート状態における例外点

森下研究室所属 物理工学プログラム
2010468 都築成玖

目的

π 状態の水素分子イオンに
分子軸と平行な方向に強電場をかけた際のエネルギーを
シーガート状態法を用いて計算し, 例外点を探す

原子・分子のトンネルイオン化



エネルギー $E = \varepsilon - i\Gamma/2$
 Γ : イオン化レート

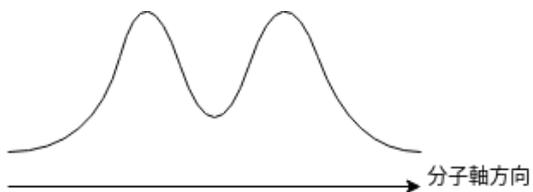
求め方: シーガート状態法

原子・分子の状態

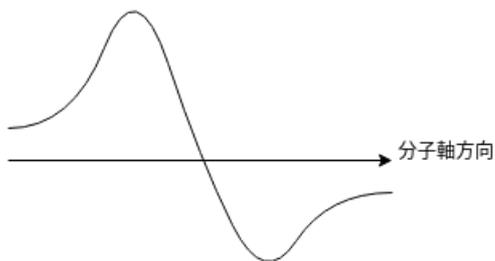
ひとつの原子・分子に対して多くの状態が存在 → 量子数で指定

| (融合)原子 | | | | 分子 | | | |
|--------|---|---|---|-------------|---------|----------|---|
| 軌道名 | n | l | m | 軌道名 | n_ξ | n_η | m |
| 1s | 1 | 0 | 0 | 1s σ | 0 | 0 | 0 |
| 2p | 2 | 1 | 1 | 2p π | 0 | 0 | 1 |

対応関係
 $n-l-1=n_\xi$
 $l-m=n_\eta$



gerade(対称)

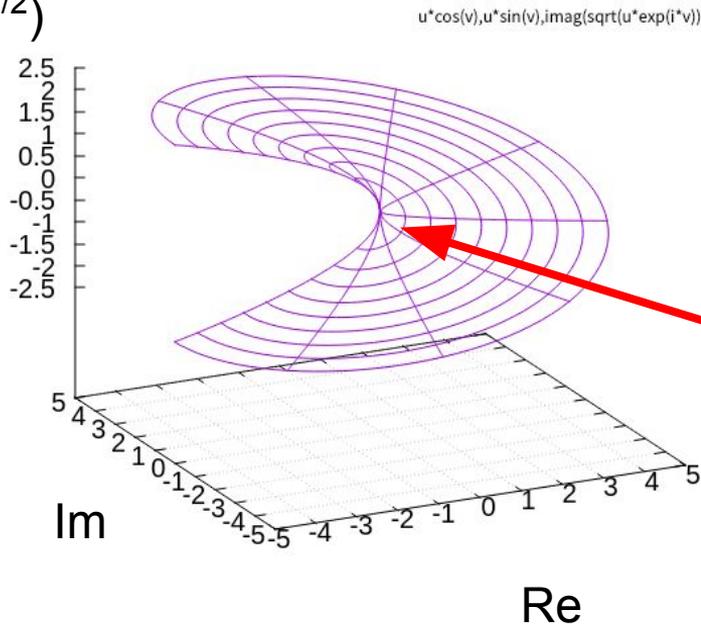


ungerade(反対称)

分岐点と例外点 1/2

複素関数 $f(z)=z^{1/2}$

$\text{Im}(z^{1/2})$

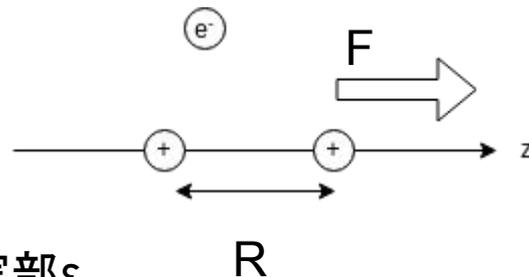


$u \cdot \cos(v), u \cdot \sin(v), \text{imag}(\text{sqrt}(u \cdot \exp(i \cdot v)))$

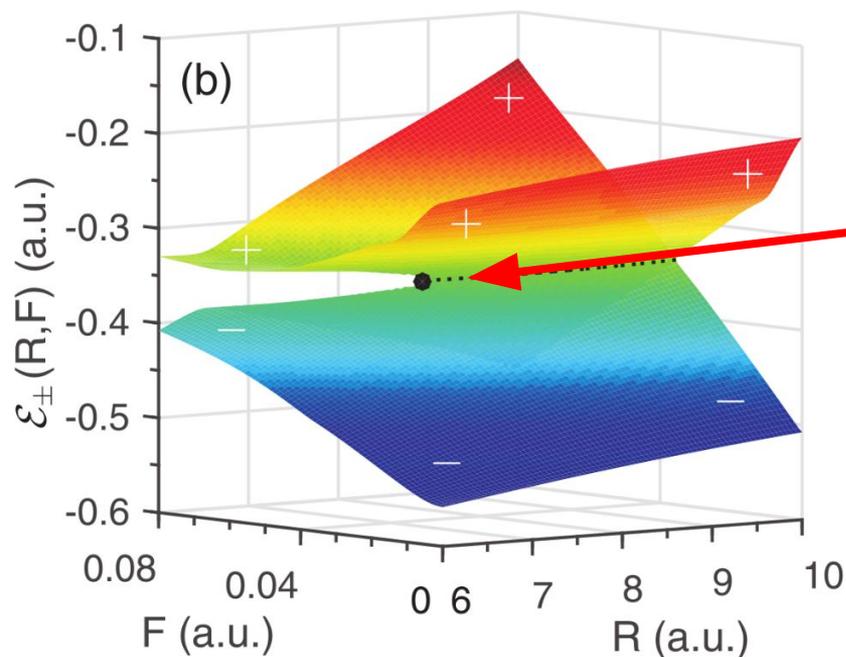
$(-1)^{1/2} = i, -i \rightarrow$ 多価関数！

原点が分岐点

分岐点と例外点 2/2



電場をかけた際の水素分子イオンのエネルギー実部 ϵ

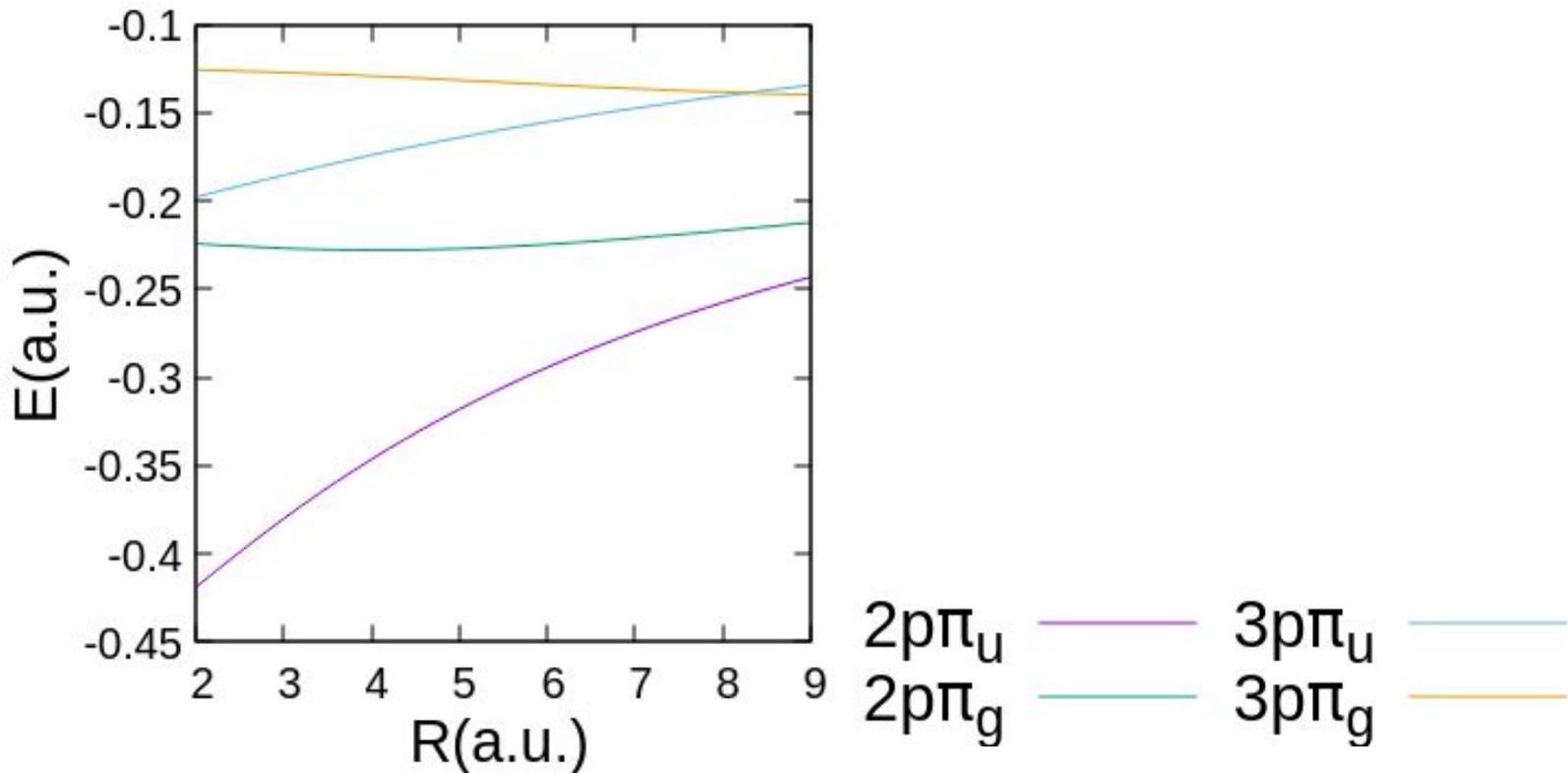


$1\sigma_u$ と $2\sigma_g$ の ϵ が
(7.92, 0.0530) で一致

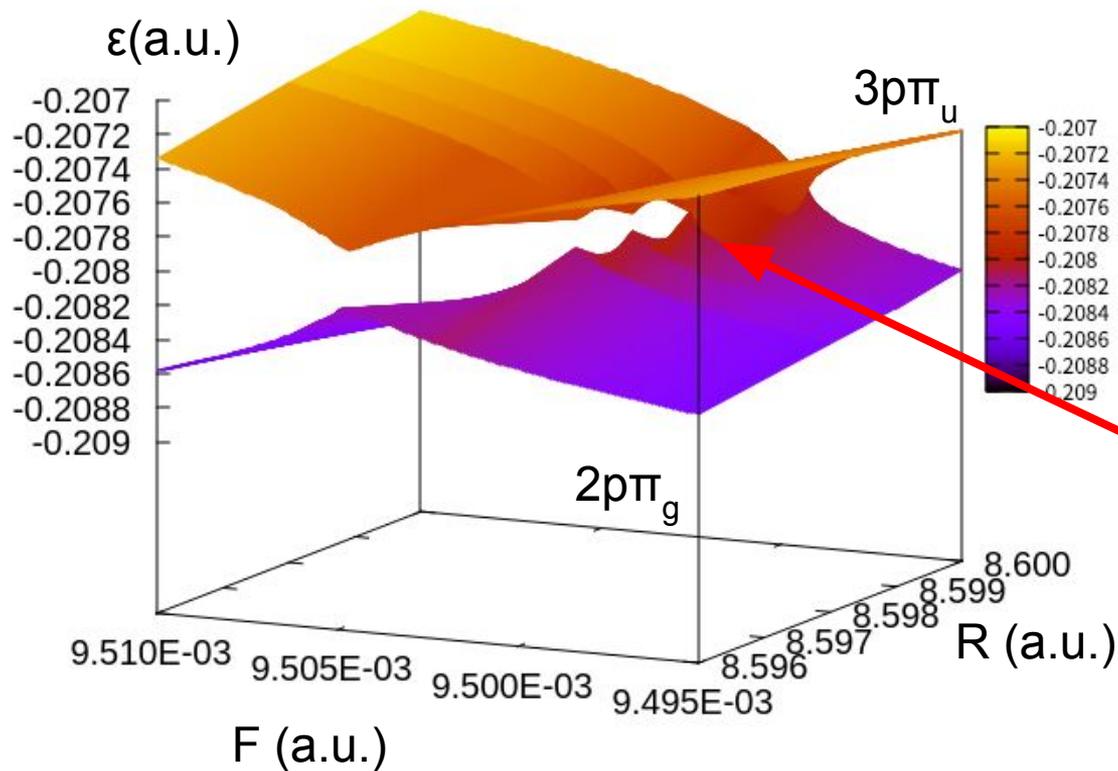
分岐点?
→ 引数がどちらも**実数**
なので**例外点**

σ 状態以外に例外点が存在するか
分からない
→ π 状態の H_2^+ の例外点を探す

電場がない場合の水素分子イオンのエネルギー

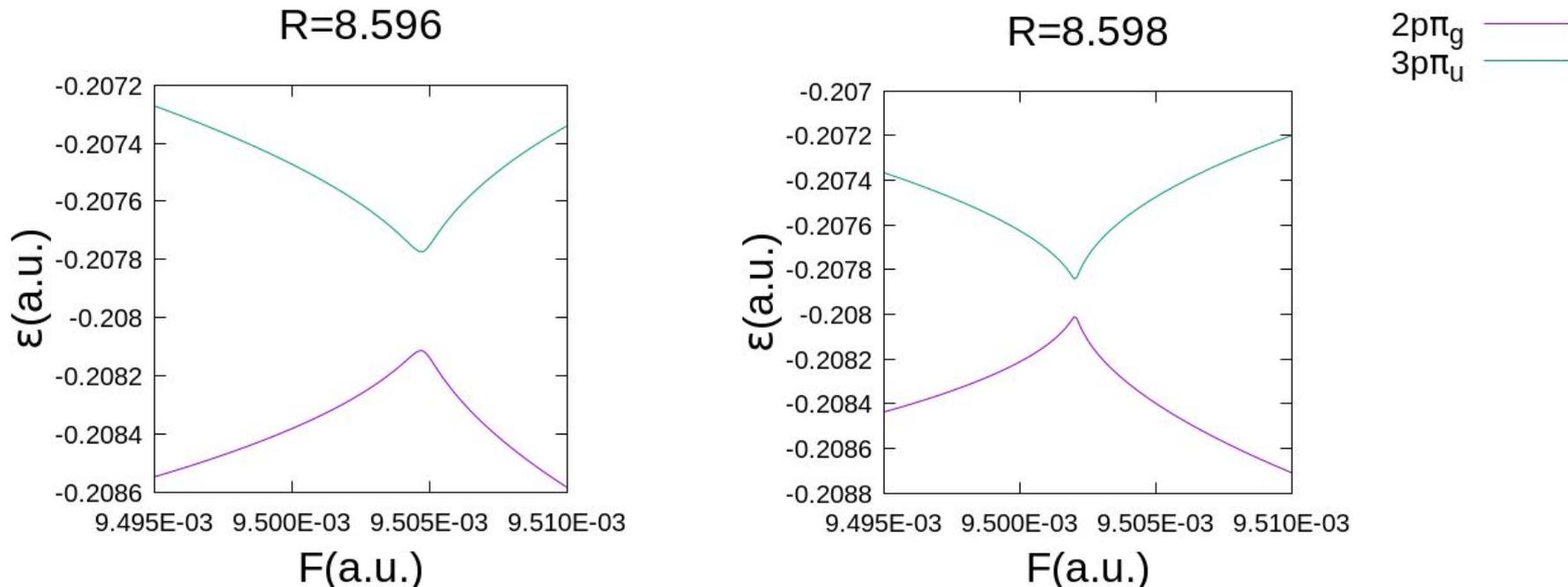


電場がある場合の水素分子イオンのエネルギー



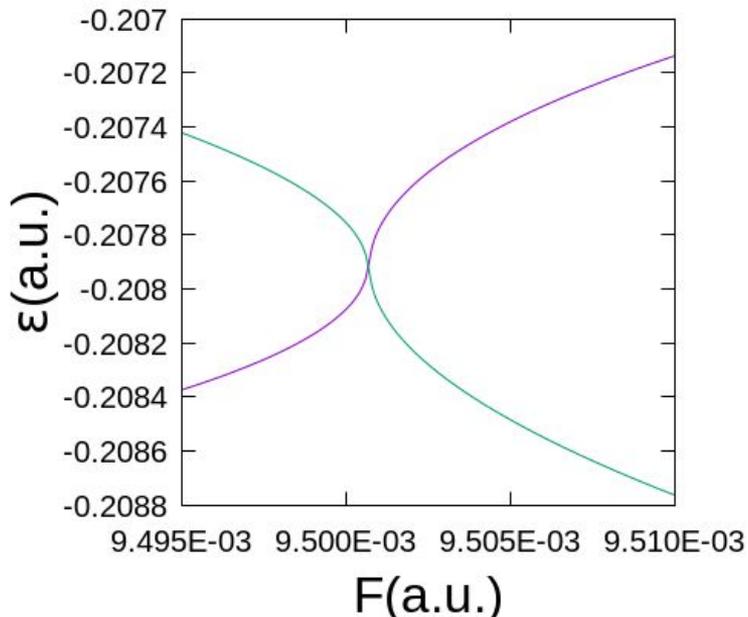
(R, F)=
(8.599, 9.501×10^{-3})
に例外点が存在する

電場がある場合の水素分子イオンのエネルギー ε 1/2

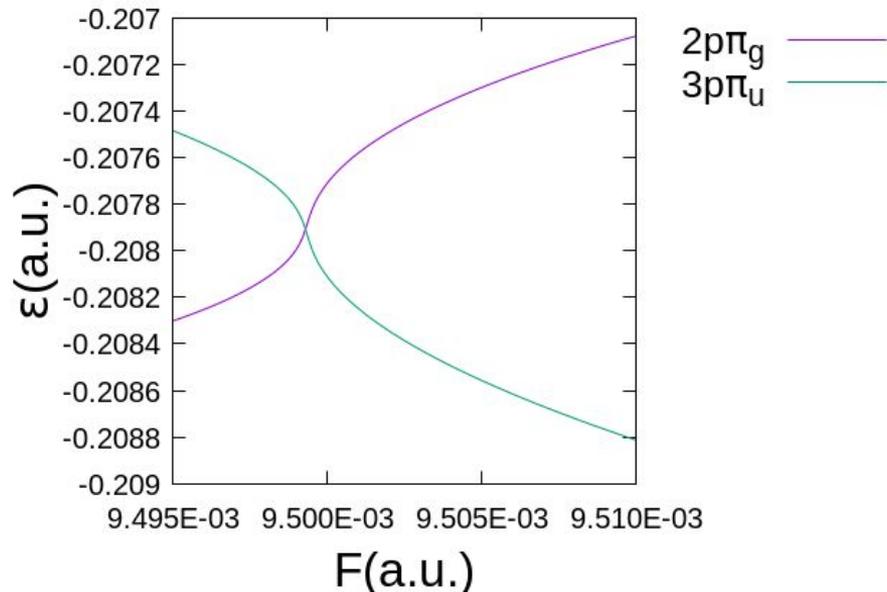


電場がある場合の水素分子イオンのエネルギー ϵ 2/2

R=8.599



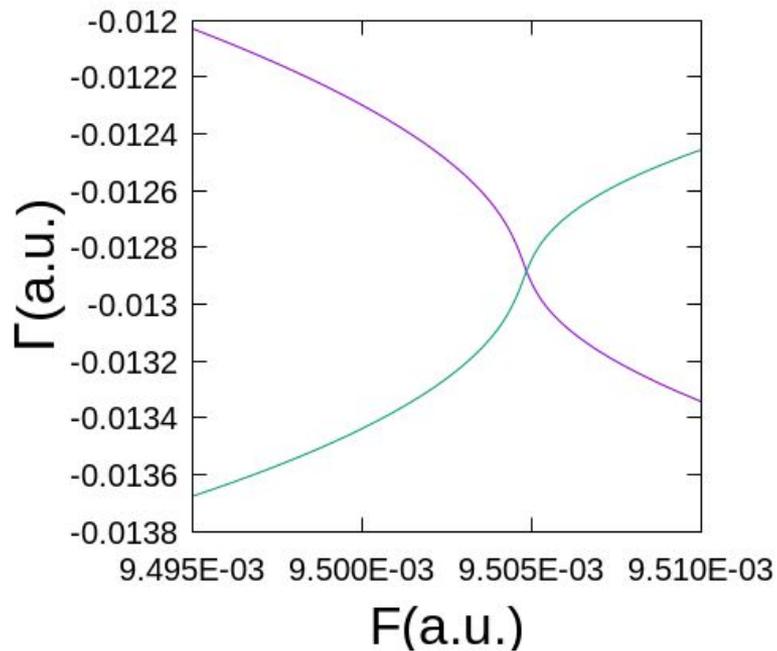
R=8.6



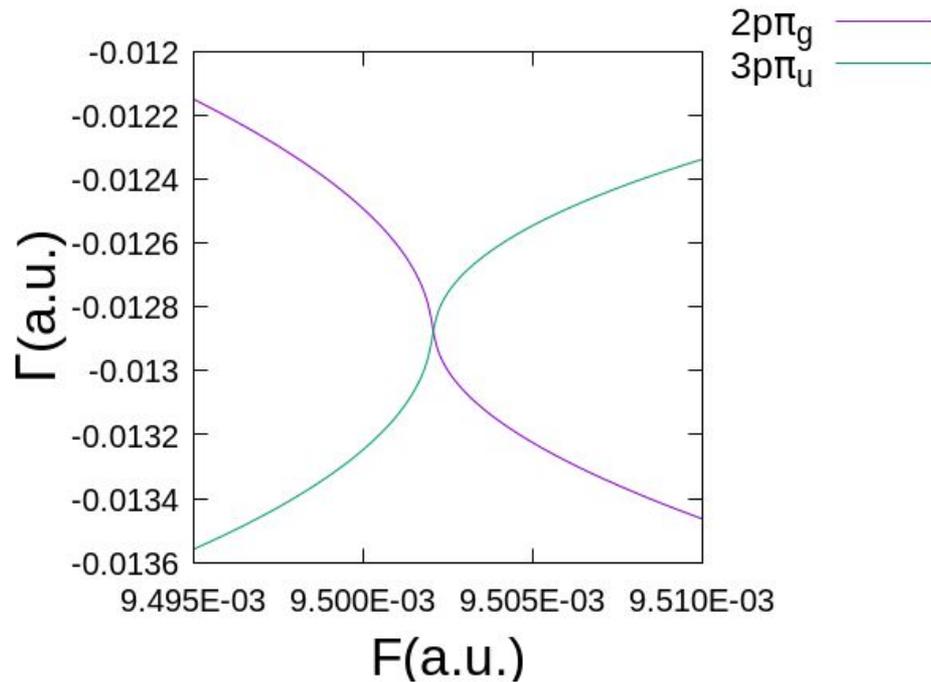
例外点が π 状態に見出された

電場がある場合の水素分子イオンのイオン化レート Γ 1/2

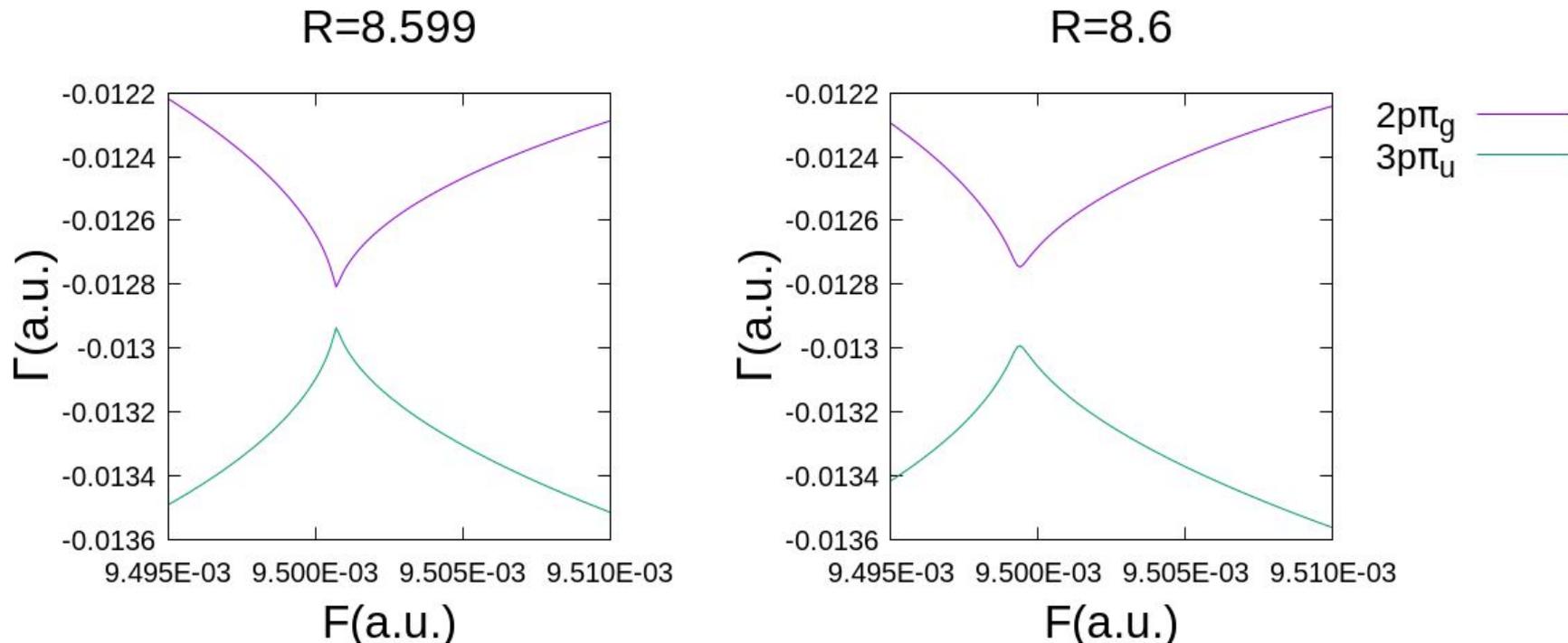
R=8.596



R=8.598

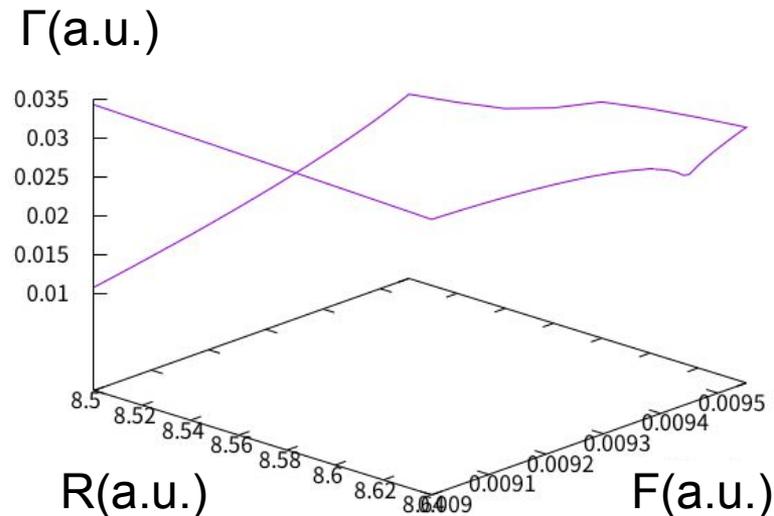
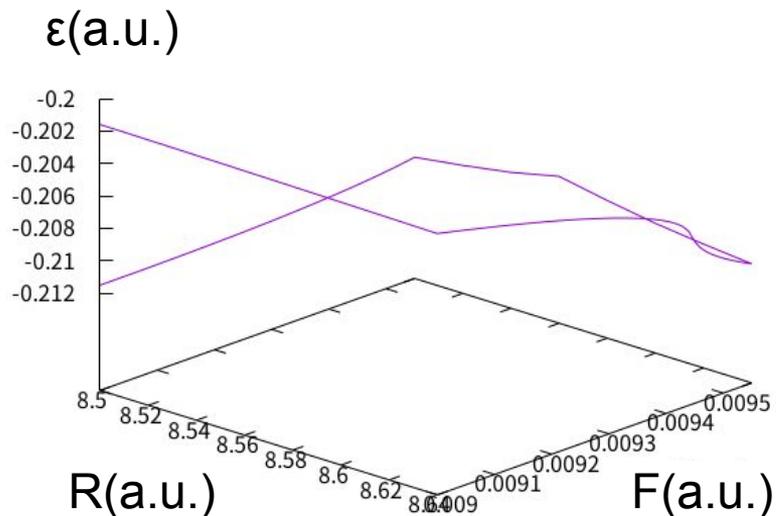


電場がある場合の水素分子イオンのイオン化レート Γ 2/2



例外点以降では Γ は反発交差する

例外点の周りを囲うような複素エネルギーの計算



始点と終点で ϵ, Γ が異なった

まとめ

- ・ π 状態の水素分子イオンに、分子軸に平行な方向に電場を加えると、
(R, F)=(8.599, 9.501×10^{-3}) (a.u.) に例外点が存在することが見いだされた
- ・例外点まわりを囲うように(R, F)を変化させながら
複素エネルギーを求めることで
始点と終点で状態が変わるという例外点の性質を確かめられた