

氏 名	都築 成玖	学籍番号	2010468
題目	強電場中の水素分子イオン: $\pi$ 状態のシーガート状態における例外点		
要 旨	指導教員氏名	森下 亨	

クーロンポテンシャルに匹敵する高強度レーザー場を原子・分子に照射すると、原子分子内の電子が感じるクーロンポテンシャルが歪み、生じた障壁を電子がトンネルしトンネルイオン化する。直線偏光のレーザーを照射すれば、トンネルイオン化した電子はレーザー電場の反転に伴って再び元の位置にある原子や分子と再衝突を起こし、高次高調波が生成される。これがアト秒レーザーパルスとなるため、トンネルイオン化の研究はアト秒科学にとって重要なものである。

強電場中でイオン化する原子・分子の固有状態を求める方法に、シーガート状態法がある。先行研究[1]では強電場中の水素分子イオンについて、外向き波境界条件における解であるシーガート状態の複素エネルギー固有値を求めている。

また先行研究[2]では、 $\sigma$ 状態の水素分子イオンの核間距離 $R$ と外部電場強度 $F$ の関数としてシーガート状態のエネルギー固有値を調べ、特定の核間距離 $R_0$ 、電場強度 $F_0$ において水素分子イオンの2つの複素固有エネルギーが一致することが示されている。このような $(R_0, F_0)$ は $(R, F)$ 空間上の例外点と呼ばれている。更に、赤外レーザーパルスに晒された水素分子イオンが陽子と水素分子に分離していく際、レーザー強度が例外点に達しているか否かで終状態が変化することも理論的に示されている。

水素分子イオンの状態は $\sigma$ 状態の他に、分子軸まわりの量子数が異なる $\pi$ 状態、 $\Delta$ 状態などがある。 $\sigma$ 状態で見られた例外点が、 $\sigma$ 状態以外の状態の水素分子イオンにあるかは分かっていない。そのため本研究では、 $\pi$ 状態の水素分子イオンに、分子軸と平行で様な強電場を加えた際の複素エネルギーを数値的に求め、電場の大きさと核間距離によるエネルギー変化の関係性を観察し、例外点を探した。これには先行研究[1]と同様のシーガート法による解析を用いた。

シーガート法を用いて、電場が存在しない場合の水素分子イオンの $2p\pi_g$ 、 $2p\pi_u$ 、 $3p\pi_g$ 、 $3p\pi_u$ 状態のエネルギーを異なる核間距離 $R$ に対して計算した。次に $2p\pi_g$ 状態と $3p\pi_u$ 状態において、電場を分子軸に平行な方向に加えた場合について計算すると、 $(R, F) \approx (8.599, 0.009501)$ (a.u.)において例外点が見出された。また、この点の周りを囲うように $(R, F)$ を少しずつ変化させて複素エネルギー固有値を計算することで、始点と終点で複素エネルギーが異なるという例外点の性質を確かめた。これは計算の途中で別の準位に移ったからである。

#### 参考文献

- [1] Linda Hamonou, Toru Morishita, and Oleg I. Tolstikhin. Molecular siegert states in an electric field. Phys. Rev. A, Vol. 86, p. 013412, Jul 2012.
- [2] Cheng Huang, Oleg I. Tolstikhin, and Toru Morishita. Strong-field subcycle control of dissociation dynamics via exceptional points of molecules in an electric field. Phys. Rev. A, Vol. 95, p. 063416, Jun 2017.