

## 目次

1 序論.....	2
2 理論.....	2
2.1 古典的な計算.....	2
2.2 量子論的な計算.....	3
2.2.1 原子.....	3
2.2.2 分子の場合.....	4
3 計算結果.....	5
4 結論.....	15
5 謝辞.....	15
6 参考文献.....	16

## 1 序論

近年、レーザー技術が発展したことで高強度のレーザーを用いた実験ができるようになった。この高強度レーザーを原子・分子に照射すると電子がイオン化する。イオン化した電子が脱励起するときに入射光の周波数よりも何倍も高い周波数の光が出る現象を高次高調波という。

高次高調波のスペクトルはもともと原子・分子内の電子の位置は量子的に考えていたが、そのスペクトルは古典で研究されていた。近年になって束縛状態が1つだけになるデルタ関数ポテンシャルの高次高調波のスペクトルを量子的に取り扱った研究 [1] が現れた。本研究ではこれを発展させて1次元で2つの束縛状態を持つ分子の高次高調波スペクトルの計算を行い、照射するレーザーや分子を変えたときのスペクトルの変化を数値実験することを目的とする。

## 2 理論

### 2.1 古典的な計算

まず高次高調波スペクトルを古典的に取り扱った計算を考える。ここでは0光子状態として考え、双極子モーメントの時間変化をフーリエ変換した  $D(\omega)$  を求める。また、ここでは簡単のため原子単位系を用いる。以下のような1次元の時間依存シュレディンガー方程式を考える。

$$i \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \{\hat{H}_a + \hat{V}_{\text{ext}}(t)\} |\Psi(t)\rangle \quad (1)$$

$$\hat{H}_a = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}_a \quad (2)$$

このとき、 $\hat{H}_a$  は原子のハミルトニアンで、 $\hat{V}_a$  は電子のポテンシャル、 $\hat{V}_{\text{ext}}(t)$  が外場によるポテンシャルである。そして、 $\hat{H}_a |\psi_n(t)\rangle = E_n |\psi_n(t)\rangle$  と計算できる。また、外場は時間  $t \in (0, T)$  で一時的に与えられるものとする。

$$\hat{V}_{\text{ext}}(t \leq 0) = \hat{V}_{\text{ext}}(t \geq T) = 0 \quad (3)$$

このとき、

$$|\Psi(t+dt)\rangle = \exp[-i\{\hat{H}_a + \hat{V}_{\text{ext}}(t)\}dt] |\Psi(t)\rangle \quad (4)$$

ここで Trotter 分解より  $\Delta t$  時間変化させた波動関数は次のように計算できる。

$$\Psi(x, t + \Delta t) = e^{-i\frac{\hbar}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}_{\text{ext}}(t)\Delta t} e^{-i\frac{\hbar}{2}\Delta t} \Psi(x, t) \quad (5)$$

このように時間変化をさせて出てきた波動関数から双極子モーメント  $D(\omega)$  を次のように求めた。

$$D(\omega) = \int e^{-i\omega t} \langle \Psi(x, t) | x | \Psi(x, t) \rangle dt \quad (6)$$

## 2.2 量子論的な計算

### 2.2.1 原子

先行研究 [1] では原子の高次高調波スペクトルの計算がされている。これについて簡単に説明する。古典の計算から発展させ、1光子状態で考えると場のハミルトニアン  $\hat{H}_f$  と相互作用のハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{int}}$  を考える。0光子状態  $|0\rangle$  とモード  $\nu$  の1光子状態  $|\nu\rangle$  は次のように表される。

$$|0\rangle = \prod_{\nu} |0\rangle_{\nu}, \quad \hat{H}_f |0\rangle = 0 \quad (7)$$

$$|\nu\rangle = \hat{a}_{\nu}^{\dagger} |0\rangle = |1\rangle_{\nu} \prod_{\nu' \neq \nu} |0\rangle_{\nu'}, \quad \hat{H}_f |\nu\rangle = \omega |\nu\rangle \quad (8)$$

相互作用を考えない原子と場のハミルトニアン  $\hat{H}_0$  を考えると、

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{\pm}\rangle |0\rangle = E_n |\psi_n^{\pm}\rangle |0\rangle \quad (9)$$

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{\pm}\rangle |\nu\rangle = (E_n + \omega) |\psi_n^{\pm}\rangle |\nu\rangle \quad (10)$$

相互作用を考えたときの0光子と1光子の固有ベクトルをそれぞれ  $|\psi_n^{\pm}, 0\rangle$ ,  $|\psi_n^{\pm}, \nu\rangle$  とした。そして、周波数  $\omega$  の光子が放出される総確率  $Q_1(\omega)$  を周波数ごとに分けて計算し、これを高次高調波スペクトルとする。

$$Q_1(\omega) = \sum_n |\langle \psi_n^-, \nu | \Psi(t \geq T) \rangle|^2 \quad (11)$$

初期状態を

$$|\Psi(0)\rangle = |\psi_0^+, 0\rangle \quad (12)$$

とすると、シュレディンガー方程式の解となる  $|\Psi(t)\rangle$  は次のように表される。

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n A_n(t) e^{-iE_n t} |\psi_n^-, 0\rangle + \alpha \sum_{n\nu} B_{n\nu} e^{-i(E_n + \omega)t} |\psi_n^-, \nu\rangle \quad (13)$$

よって、

$$Q_1(\omega) = \alpha^2 \sum_n |B_{n\nu}|^2 \quad (14)$$

シュレディンガー方程式の解を相互作用を考えない形で説明すると

$$|\Psi(t)\rangle = |\psi(t)\rangle |0\rangle + \alpha \sum_{\nu} e^{-i\omega t} |\phi_{\nu}(t)\rangle |\nu\rangle \quad (15)$$

ここで、

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-E_n t} |\psi_n^-\rangle \quad (16)$$

$$|\phi_{\nu}(t)\rangle = \sum_n b_{n\nu}(t) e^{-E_n t} |\psi_n^-\rangle \quad (17)$$

となりこれらは次のように求められる.

$$i\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = [\hat{H}_a + \hat{V}_{\text{ext}}(t)]|\psi(t)\rangle \quad (18)$$

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle \quad (19)$$

$$i\frac{\partial|\phi_\nu(t)\rangle}{\partial t} = [\hat{H}_a + \hat{V}_{\text{ext}}(t)]|\phi_\nu(t)\rangle + e^{i\omega t}A_\nu\hat{p}|\psi(t)\rangle \quad (20)$$

$$|\phi(0)\rangle = \frac{A_\nu\hat{p}}{E_0 - \omega - \hat{H}_a \pm i\epsilon}|\psi_0\rangle \quad (21)$$

式 16, 17 を式 20 に代入して次の式 22 を使うと式 23 になる.

$$\hat{R}_\nu = i\sum_{nm} \frac{|\psi_n^-\rangle\langle\psi_n^-|A_\nu\hat{p}|\psi_m^-\rangle\langle\psi_m^-|}{E_n - E_m + \omega + i\epsilon} \quad (22)$$

$$b_{n\nu}(t \geq T) = b_{n\nu} + ie^{i(E_n+\omega)t}\langle\psi_n^-|\hat{R}_\nu|\psi(t)\rangle \quad (23)$$

式 13 と 15 を  $\alpha$  の 1 次のオーダーで比べると  $b_{n\nu} = B_{n\nu}$  とわかる. よって束縛状態が 1 つのときの量子的な計算でのスペクトル  $Q_1(\omega)$  は次のようになる.

$$Q_1(\omega) = \alpha^2 \sum_n |B_{n\nu}|^2 = \alpha^2 \sum_n |b_{n\nu}|^2 \quad (24)$$

この  $b_{n\nu}$  は式 23 より次のように計算される.

外場が過ぎた後の時間  $t \geq T$  で基底状態にいる電子が  $\omega$  の周波数の光を出す確率  $b_{0\omega}$  は

$$b_{0\omega} = b_{0\omega}(T) + \int \frac{e^{i(E_0+\omega+E_{k'})T}p_{0k'}a_{k'}}{E_0 + \omega - E_{k'} + i0} \frac{dk'}{2\pi} \quad (25)$$

ここで  $b_{0\omega}(T) = e^{-iE_0t}\langle\psi_0|\phi_\omega t\rangle$  で計算される非同次の項を含む確率,  $a_{k'}$  は電子が外場によって入射運動量  $k'$  に対応する連続状態まで励起される確率で,  $p_{0k'}$  は入射運動量  $k'$  に対応する連続状態にいる電子が双極子遷移で励起状態まで落ちてくる確率を表している. また,  $t \geq T$  で入射運動量  $k$  に対応する連続状態にいる電子が  $\omega$  の周波数の光を出す確率  $b_{k\omega}$  は

$$b_{k\omega} = b_{k\omega}(T) + \frac{e^{i(E_k+\omega+E_0)T}p_{k0}a_0}{E_k + \omega - E_0} + \int \frac{e^{i(E_k+\omega+E_{k'})T}p_{kk'}a_{k'}}{E_k + \omega - E_{k'} + i0} \frac{dk'}{2\pi} \quad (26)$$

## 2.2.2 分子の場合

本研究では先行研究 [1] の原子の高次高調波スペクトルを分子に拡張して考える. 原子の場合はポテンシャルの深さを調整して束縛状態が 1 つになるようにしたが, 分子を扱うとして束縛状態が 2 つ以上になるようなポテンシャルを扱う. 束縛状態の数を  $N_{\text{bound}}$  とすると光子が放出される総確率になるので

$$Q_2(\omega) = \sum_J^{N_{\text{bound}}} |b_{J\omega}|^2 + \int |b'_{k\omega}|^2 \frac{dk}{2\pi} \quad (27)$$

このとき、 $t \geq T$ でJ番目の束縛状態にいる電子が $\omega$ の周波数の光を出す確率 $b_{J\omega}$ は次のように計算される。

$$b_{J\omega} = b_{J\omega}(T) + \sum_{I \neq J}^{N_{\text{bound}}} \frac{e^{i(E_J + \omega + E_I)T} p_{JI} a_I}{E_J + \omega - E_I} + \int \frac{e^{i(E_J + \omega + E_{k'})T} p_{Jk'} a_{k'}}{E_J + \omega - E_{k'} + i0} \frac{dk'}{2\pi} \quad (28)$$

同様に $b_{k\omega}$ は次のように計算される。

$$b_{k\omega} = b_{k\omega}(T) + \sum_I^{N_{\text{bound}}} \frac{e^{i(E_k + \omega + E_I)T} p_{kI} a_I}{E_k + \omega - E_I} + \int \frac{e^{i(E_k + \omega + E_{k'})T} p_{kk'} a_{k'}}{E_k + \omega - E_{k'} + i0} \frac{dk'}{2\pi} \quad (29)$$

ここで参考文献 [1] の (93a) より次のようになる。

$$\psi_k^{(\pm)}(x) = e^{ikx} + R(\pm|k|)e^{\pm i|k|x} \quad (30)$$

$k > 0$  としたときに  $|\psi_k^{(\pm)}\rangle$  を偶関数と奇関数に分けると次のようになる。

$$\psi_k^{(\pm)}(x) = \psi_k^e(x) + \psi_k^o(x) \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \psi_k^e(x) &= \frac{1}{2} \{ \psi_k^{(\pm)}(x) + \psi_k^{(\pm)}(-x) \} \\ &= \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} + R(\pm|k|)e^{\pm i|k|x} = \cos(ikx) + R(\pm|k|)e^{\pm i|k|x} \end{aligned} \quad (32)$$

$$\psi_k^o(x) = i \sin(ikx) \quad (33)$$

このとき、 $\psi_k^e - \psi_k^o = e^{-ikx} + R(\pm|k|)e^{\pm i|k|x} = \psi_{-k}^{(\pm)}(x)$  となり  $k$  が負のときの波動関数を表せる。これを利用して

$$p_{kk'} a_{k'} = \bar{k} p |k'\rangle \langle k' | |\Psi\rangle = \langle k | p \{ \psi_{k'}^e(x) + \psi_{k'}^o(x) \} \{ \psi_k^e(x') + \psi_k^o(x') \}^* |\Psi\rangle \quad (34)$$

$p_{kk'} a_{k'}$  は  $dk'$  で積分され、 $E_{k'} = \frac{k'^2}{2}$  と計算されることから

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(E_k + \omega + E_{k'})T} p_{kk'} a_{k'}}{E_k + \omega - E_{k'} + i0} \frac{dk'}{2\pi} = \int_0^{\infty} \frac{e^{i(E_k + \omega + E_{k'})T} |\psi_{k'}^e(x)|^2 + |\psi_{k'}^o(x)|^2 \langle k | p |\Psi\rangle dk'}{E_k + \omega - E_{k'} + i0} \frac{dk'}{2\pi} \quad (35)$$

これを利用して、連続状態を離散状態と考えて次のような計算も行った。

$$b_{n\omega} = b_{n\omega}(T) + \sum_I^N \frac{e^{i(E_n + \omega + E_I)T} p_{nI} a_I}{E_n + \omega - E_I + i0} \quad (36)$$

$$b'_{n\omega} = b_{n\omega}(T) + \sum_J^{N_{\text{bound}}} \frac{e^{i(E_n + \omega + E_J)T} p_{nJ} a_J}{E_n + \omega - E_J} + \sum_I^N \frac{e^{i(E_n + \omega + E_I)T} p_{nI} a_I}{E_n + \omega - E_I + i0} \quad (37)$$

$$Q(\omega) = \sum_n b_{n\omega} \quad (38)$$

### 3 計算結果

本研究では原子のポテンシャルとして束縛状態が1つになるデルタ関数のポテンシャル式 39 を、分子のポテンシャルとして束縛状態が2つになる式 40 のポテンシャルを使った。

$$\hat{V}_a = -1.034447744e^{-x^2} \quad (39)$$

$$\hat{V}_a = -1.034447744(e^{-(x-\frac{R}{2})^2} + e^{-(x+\frac{R}{2})^2}) \quad (40)$$

このとき  $R$  は核間距離である.

また定数  $\tau = \frac{2\pi n_{OC}}{|\omega_0|}$ ,  $T = 1.75\tau$  として, 電場  $F(t)$  は  $t \in [0, T]$  で与えられ次のようになる.

$$F(t) = F_0 \exp\left\{-\left(\frac{2t}{\tau}\right)^2\right\} \cos(\omega_0 t) \quad (41)$$

よってサイクル数  $n_{OC} = 2$ , 電場強度  $F_0 = 0.1$  のとき電場は次の図1のようになる.

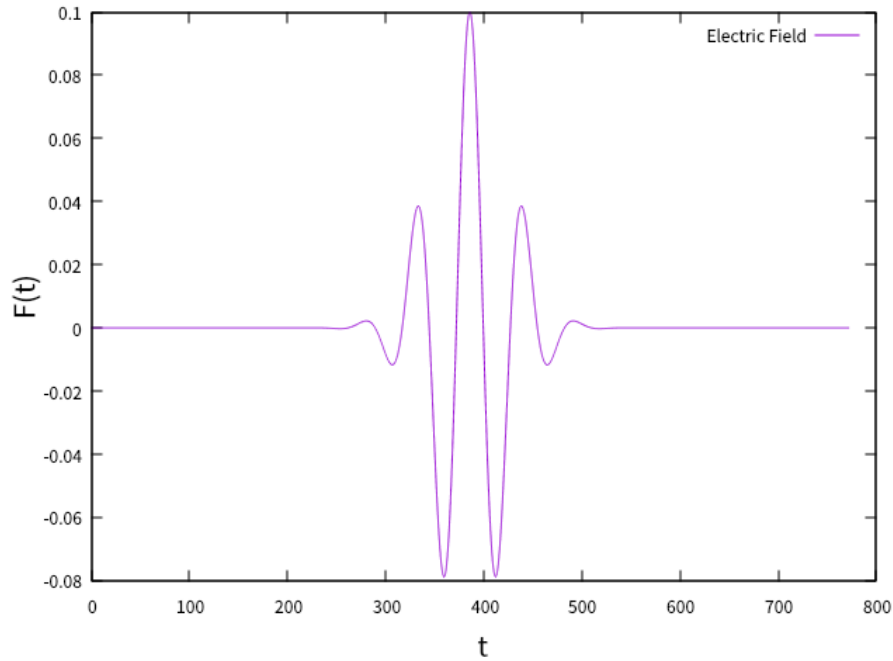


図1: 入射される電場

本研究では周波数  $\omega_0 = 0.114$  で固定し, 電場強度  $F_0$  とサイクル数  $n_{OC}$  を変えて実験を行った. まず, 振幅  $F_0$  を 0.1 に固定してサイクル数  $n_{OC}$  が 2 のときと 4 のときの原子のスペクトルは図 2, 3 のようになった. 紫の線が古典のスペクトル, 緑の線が束縛状態が 1 個として計算したときのスペクトル, 黄色の線が式 36, 38 の近似をしたときのスペクトルである. このとき, 電子の基底状態における存在確率はサイクル数 2 のとき 0.9699, サイクル数 4 のとき 0.9322 である.

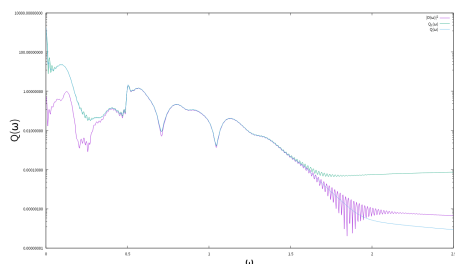


図 2: サイクル数 2 の原子のスペクトル

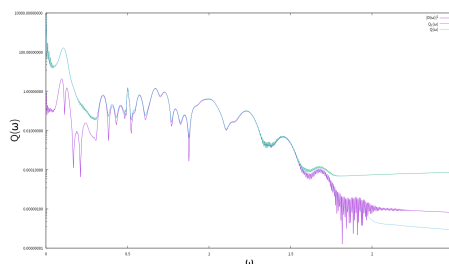


図 3: サイクル数 4 の原子のスペクトル

図 2, 3 からどちらのサイクル数でも  $\omega$  が 0.5 から 1.5 で 3 つのスペクトルが重なっている。また、 $\omega = 1.5$  以上でスペクトルが小さくなり一定になっているが、これは高次高調波でこれ以上の周波数のスペクトルが得られないことで起こるノイズと考えられる。

次に分子の核間距離  $R$  を 1, 2, 3, 4, 5 で変化させた計算結果は次の図 4-13 ようになる。紫の線が古典のスペクトル、緑の線が束縛状態が 1 個として計算したときのスペクトル、水色の線が束縛状態が 2 個として計算したときのスペクトルで、黄色の線が 2 個として計算し式 36, 38 の近似をしたときのスペクトルである。

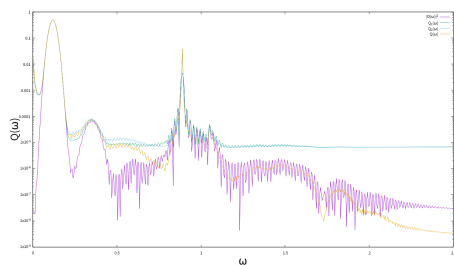


図4: サイクル数2で核間距離 R=1 のスペクトル

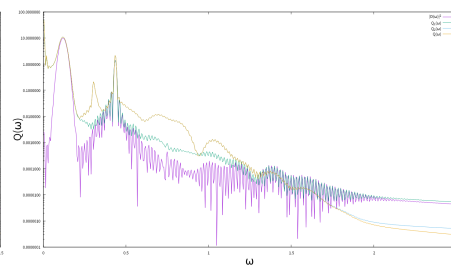


図5: サイクル数2で核間距離 R=2 のスペクトル

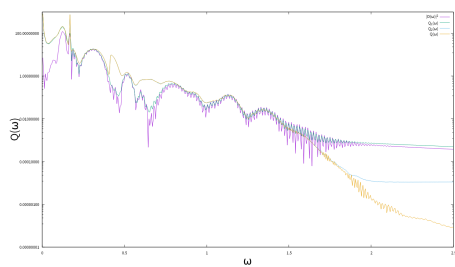


図6: サイクル数2で核間距離 R=3 のスペクトル

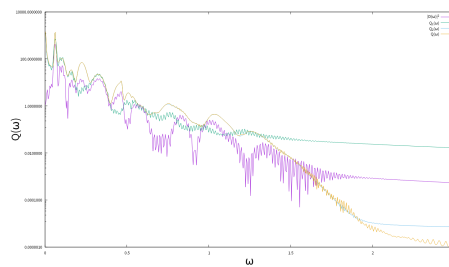


図7: サイクル数2で核間距離 R=4 のスペクトル

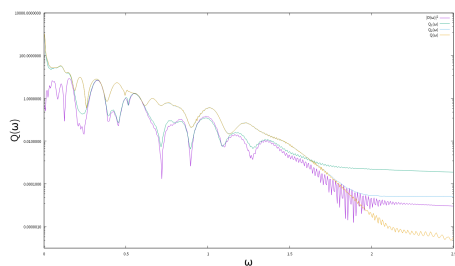


図8: サイクル数2で核間距離 R=5 のスペクトル

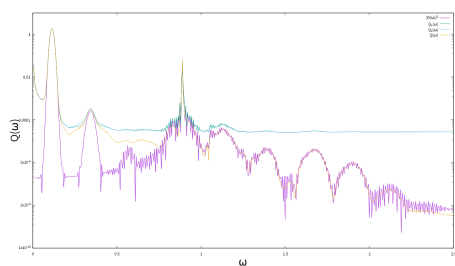


図9: サイクル数4で核間距離 R=1 のスペクトル

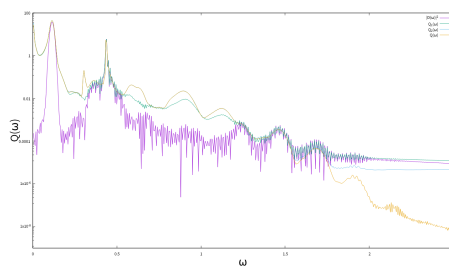


図10: サイクル数4で核間距離 R=2 のスペクトル

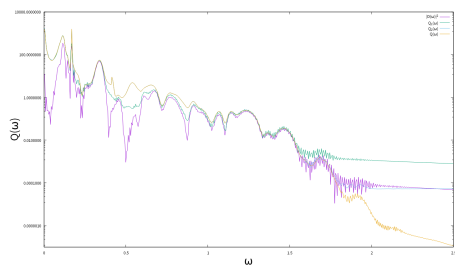


図11: サイクル数4で核間距離 R=3 のスペクトル

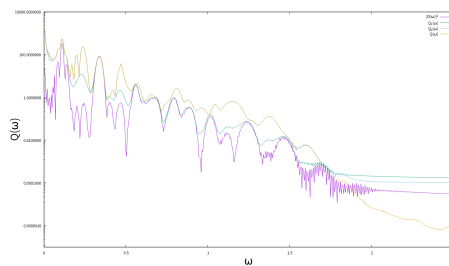


図12: サイクル数4で核間距離 R=4 のスペクトル

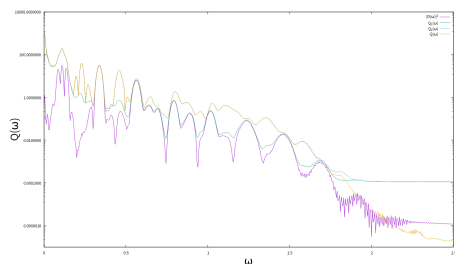


図13: サイクル数4で核間距離 R=5 のスペクトル

このとき、 $t \geq T$ におけるそれぞれの電子の基底状態と励起状態の存在確率は次の表1, 2のようになる。

表1: サイクル数2のときの電子の存在確率

R	1	2	3	4	5
基底	0.999998	20.9981	0.8980	0.6056	0.9497
励起	9.960E-8	4.833E-5	7.275E-3	0.3323	7.928E-3

表 2: サイクル数 4 のときの電子の存在確率

R	1	2	3	4	5
基底	0.999996	0.9969	0.8570	0.8858	0.9269
励起	1.025E-7	0.7106E-5	1.115E-2	1.343E-3	3.665E-5

表 1, 2 を図にすると次の図 14, 15 のようになる.

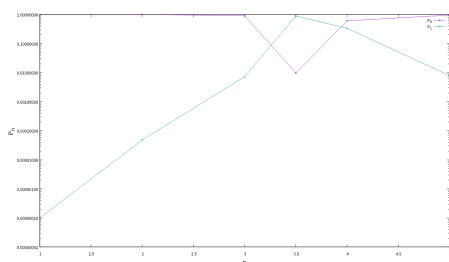


図 14: 各間距離  $R$  に対するサイクル数 2 のときの電子の存在確率

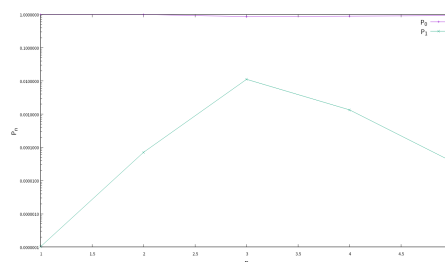


図 15: 各間距離  $R$  に対するサイクル数 4 のときの電子の存在確率

この結果から束縛状態を 2 つとして考えたスペクトル (水色) と近似して束縛状態を 2 つと考えたスペクトル (黄色) が重なっている. また, 基底状態の確率が高いときに束縛状態を 1 つとして計算したスペクトルが  $Q_1(\omega)$  のスペクトルが古典のスペクトルに近似することがわかる. これを詳しくみるために,  $R=2$  のサイクル数 2 と 4 の場合の束縛状態が 2 つとして計算したスペクトル  $Q'(\omega)$  を  $|b_{0\omega}|^2$ ,  $|b_{1\omega}|^2$ ,  $|b_{k\omega}|^2$  に分解した図は次の図 16, 17 のようになる.

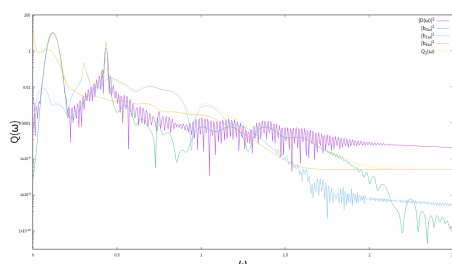


図 16: サイクル数 2 で核間距離  $R=2$  の展開したスペクトル

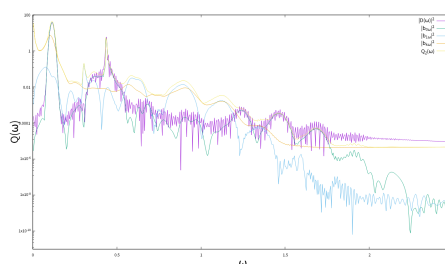


図 17: サイクル数 4 で核間距離  $R=2$  の展開したスペクトル

これより, 基底状態の存在確率が高いとき古典のスペクトルに  $|b_{0\omega}|^2$  のスペクトルが近似していることがわかる. 次にサイクル数  $n_{OC} = 2$ , 電場強度  $F_0 = 0.1$  で励起状態の存在確率が高くなるような核間距離  $R = 3.5$  で入射する電場強度  $F_0$  を変えて計算した結果が図 18-21 である. このとき, 紫の線が古典のスペクトル, 緑の線が束縛状態 2 個として計算し式 37, 38 の近似をしたとき

のスペクトルである。

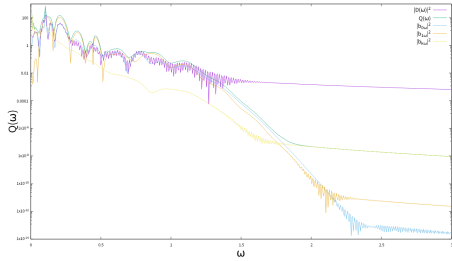


図 18: 電場強度  $F_0 = 0.08$  で核間距離  $R=3.5$  のスペクトル

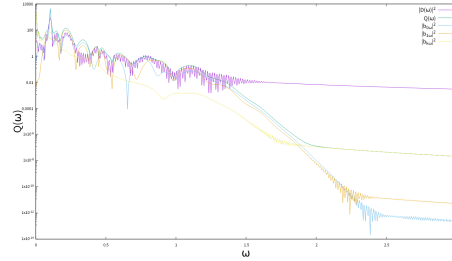


図 19: 電場強度  $F_0 = 0.088$  で核間距離  $R=3.5$  のスペクトル

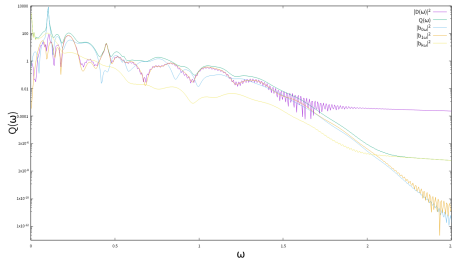


図 20: 電場強度  $F_0 = 0.1$  で核間距離  $R=3.5$  のスペクトル

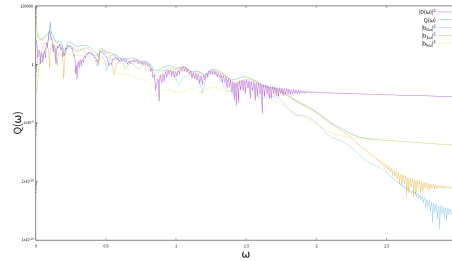


図 21: 電場強度  $F_0 = 0.12$  で核間距離  $R=3.5$  のスペクトル

このときのそれぞれの電子の基底状態と励起状態の存在確率は表 3 のようになった。

表 3: 核間距離  $R=3.5$  のときの電子の存在確率

$F_0$	0.08	0.88	0.1	0.12
基底	0.9086	0.4768	9.964E-3	0.3319
励起	4.792E-2	0.4491	0.8895	0.4507

この結果から、励起状態の存在確率が大きい場合  $b_{1\omega}$  のスペクトルが古典のスペクトルに近似し、基底状態と励起状態がほとんど等しいとき 2 つのスペクトルが交互に古典のスペクトルと重なることがわかる。

この存在確率が大きい束縛状態のスペクトルが古典のスペクトルに近似することを式 28 に当てはめる。基底状態の存在確率を  $a_0 \equiv 1$  とすると

$$b_{0\omega} = b_{0\omega}(T) + \sum_{I \neq 0}^{N_{\text{bound}}} \frac{e^{i(E_0 + \omega + E_I)T} p_{0I} a_I}{E_0 + \omega - E_I} + \int \frac{e^{i(E_0 + \omega + E_{k'})T} p_{0k'} a_{k'}}{E_J + \omega - E_{k'} + i0} \frac{dk'}{2\pi} \equiv b_{0\omega}(T) \quad (42)$$

このときの励起状態は同様に

$$\begin{aligned}
 b_{1\omega} &= b_{1\omega}(T) + \sum_{I \neq 1}^{N_{\text{bound}}} \frac{e^{i(E_1 + \omega + E_I)T} p_{1I} a_I}{E_1 + \omega - E_I} + \int \frac{e^{i(E_1 + \omega + E_{k'})T} p_{1k'} a_{k'}}{E_J + \omega - E_{k'} + i0} \frac{dk'}{2\pi} \\
 &\doteq b_{1\omega}(T) + \frac{e^{i(E_1 + \omega + E_0)T} p_{10} a_0}{E_1 + \omega - E_0}
 \end{aligned} \tag{43}$$

となる。これを基底状態の存在確率が高い  $F_0 = 0.1, n_{OC} = 2, R = 3$  で計算すると図のようになった。

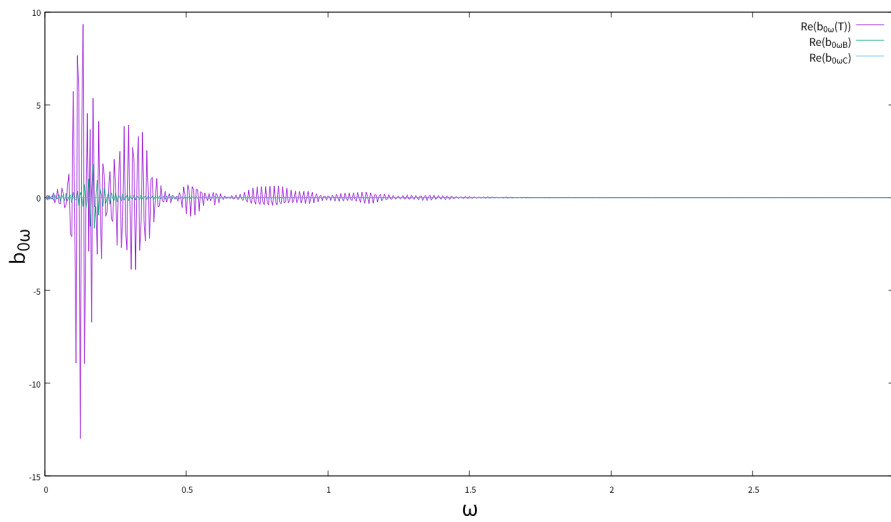


図 22:  $b_{0\omega}$  の実数部分のスペクトル

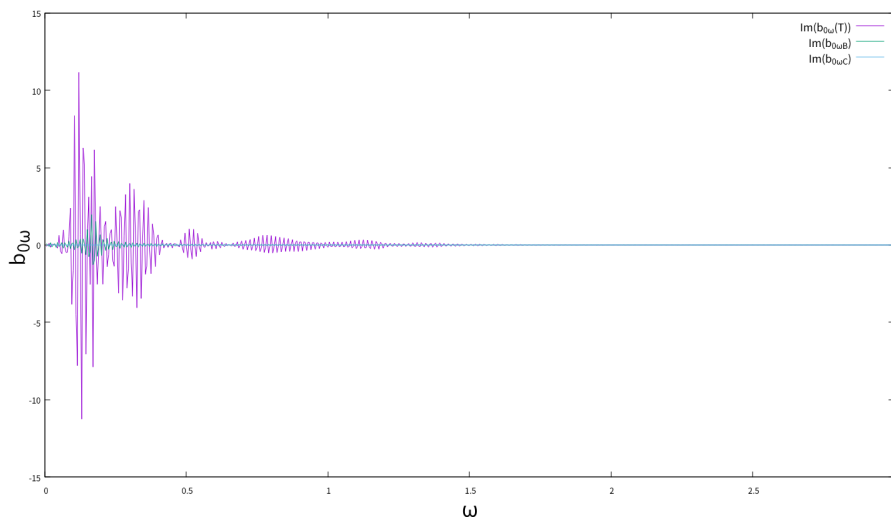


図 23:  $b_{0\omega}$  の虚数部分のスペクトル

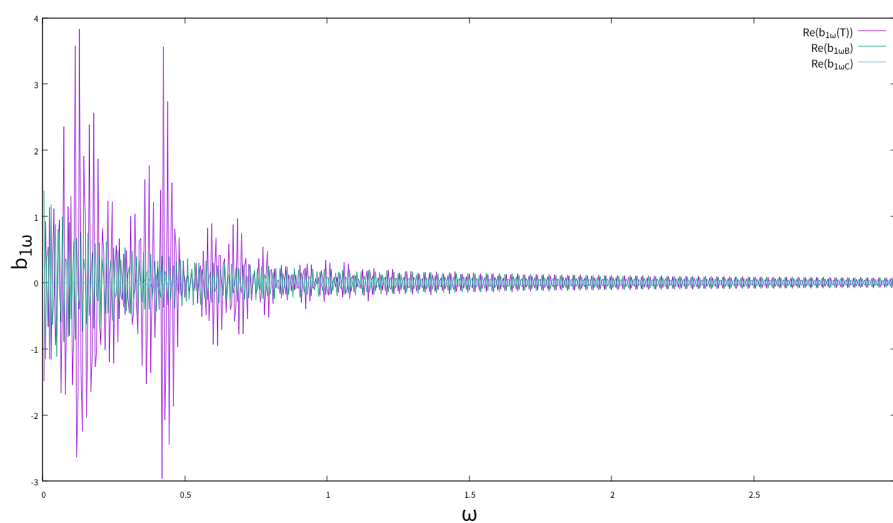


図 24:  $b_{1\omega}$  の実数部分のスペクトル

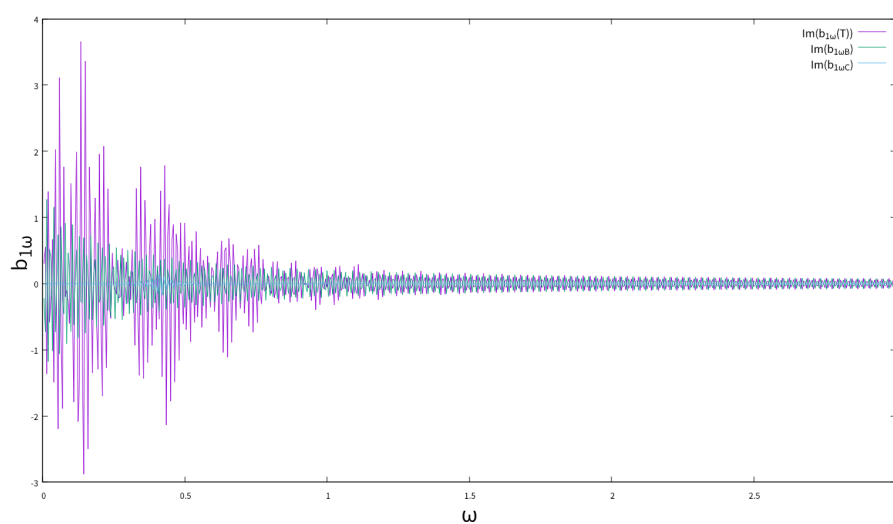


図 25:  $b_{1\omega}$  の虚数部分のスペクトル

図 22-25 は  $b_{0\omega}$  と  $b_{1\omega}$  の各項を実数部分と虚数部分に分けてプロットしたものである。紫色の線が第 1 項である  $b_{n\omega}(T)$ 、緑色の線が第 2 項である  $b_{n\omega(B)}$ 、水色の線が第 3 項である  $b_{n\omega(C)}$  である。式 42 と 43 の近似のとおり、図 22, 23 はともに初項が第 2, 3 項と比べて大きいことがわかる。図 24, 25 でも初項と第 2 項が第 3 項と比べて大きいことが分かり、近似と同じことが起きていることが確認できる。

また、電場強度  $F_0 = 0.2$  核間距離  $R = 3$  として基底状態の存在確率  $P_0$  が 0.1905、励起状態の存在確率  $P_1$  が 4.436E-2 となったときのスペクトルは次の図 26 のようになる。

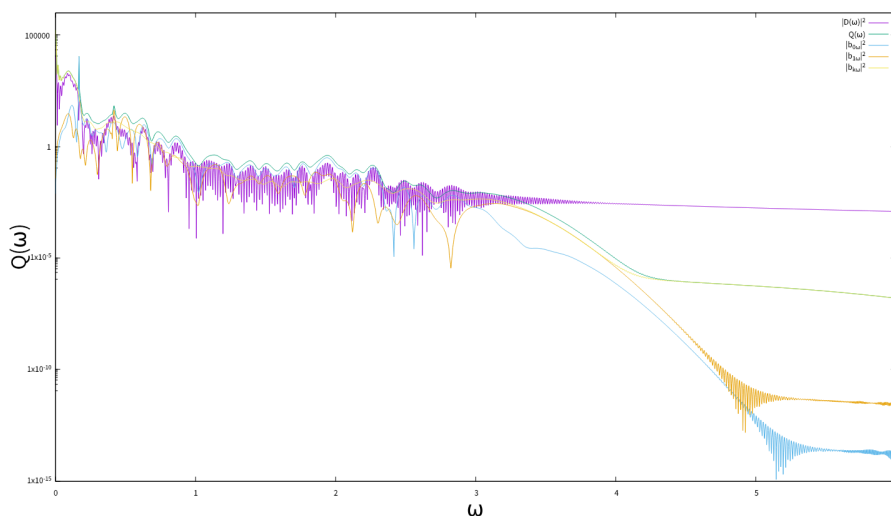


図 26: 電場強度  $F_0 = 0.2$  で  $R = 3$  のスペクトル

このとき、連続状態での電子の存在確率が7割を超えていて、 $|b_{k\omega}|^2$  のスペクトル (黄色) が図 18–21 での  $|b_{k\omega}|^2$  のスペクトルと比べて大きいことがわかる。さらに、古典のスペクトルは19%を占める  $|b_{1\omega}|^2$  のスペクトルと近いことがわかる。

また、古典のスペクトルに現れる細かい振動は双極子モーメントを計算するときの端点が0でないことによるものと考えられる。そのため、双極子モーメントが端点で0になるように一次関数を引いた古典のスペクトルを計算した。このときの端点の位置による影響を調べるため次の図 27 で示される 14001, 13766, 13530, 13060 を端点としたときのスペクトルを計算した。このときの図は図 28 のようになる。

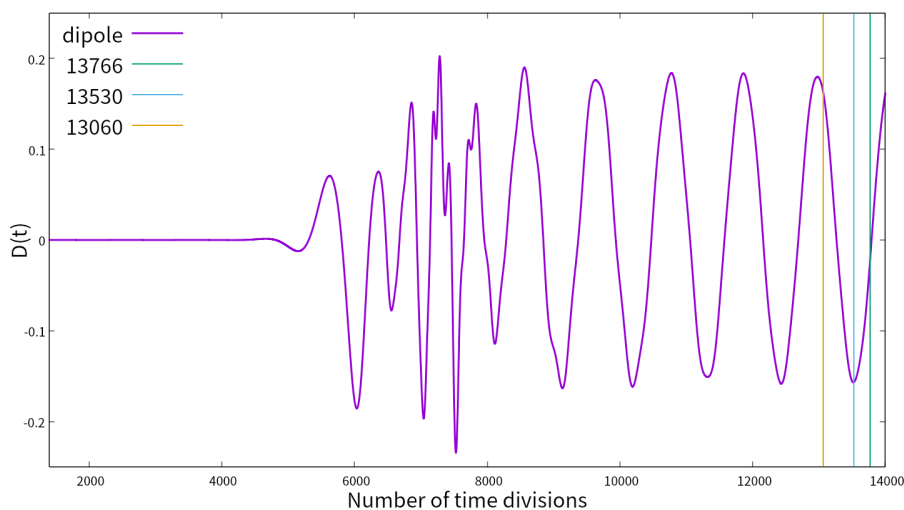


図 27: 14000 点に分割された時間に対する双極子モーメント

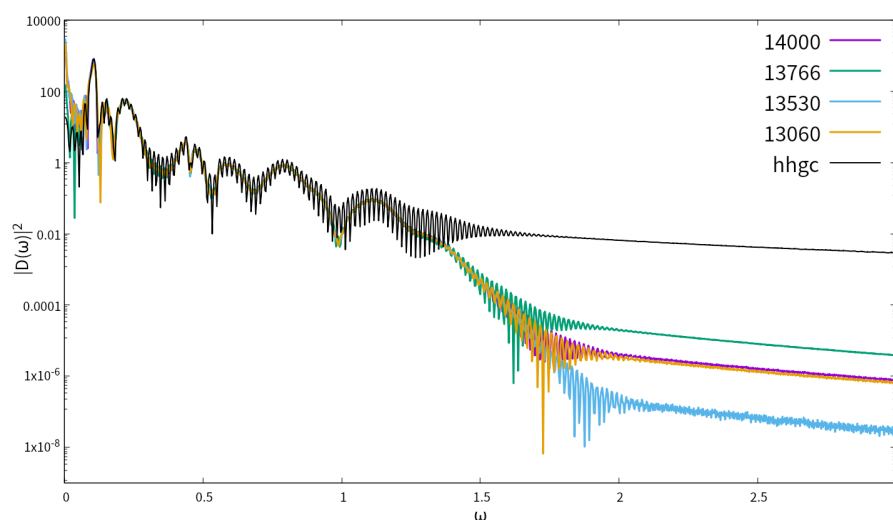


図 28: 古典のスペクトルの比較

図 28 から元の古典のスペクトルと比べると端点を 0 にしたスペクトルは細かい振動が減ったことがわかる。また、端点を 0 にしたスペクトルの中でも端点の位置によってスペクトルは上下するが角周波数  $\omega \leq 1.5$  がでは大きな違いがないことがわかった。このとき双極子モーメントの傾きが 0 に近いほどスペクトルのノイズは小さくなることがわかる。

## 4 結論

本研究では分子の高次高調波のスペクトルを数値計算した。高次高調波のスペクトルは外場によって励起された電子の準位ごとにスペクトルは分けることができる。電子の遷移率が大きい束縛状態のスペクトルは古典のスペクトルに対応する。また、束縛状態のスペクトルはそれぞれの準位の存在確率に関わらずスペクトルの大きさは同程度となる。よって、束縛状態が 2 個で基底状態での電子の確率が高いとき、古典との差はほとんど励起状態のスペクトルに一致する。これは古典の計算には含まれていない放出光との相互作用によるものだと考えている。

## 5 謝辞

本研究を進めるにあたり、森下教授には研究に必要な知識など多くのご指導をいただき心より感謝申し上げます。また、長谷川助教授にも研究についての助言をいただき深く感謝申し上げます。

## 6 参考文献

### 参考文献

- [1] Danis N.Yangaliev, Vladimir P.Krainov, and Oleg I. Tolstikhin Quantum theory of radiation by nonstationary systems with application Phys. Rev. A, Vol 101, p. 013410, Jan 2020.