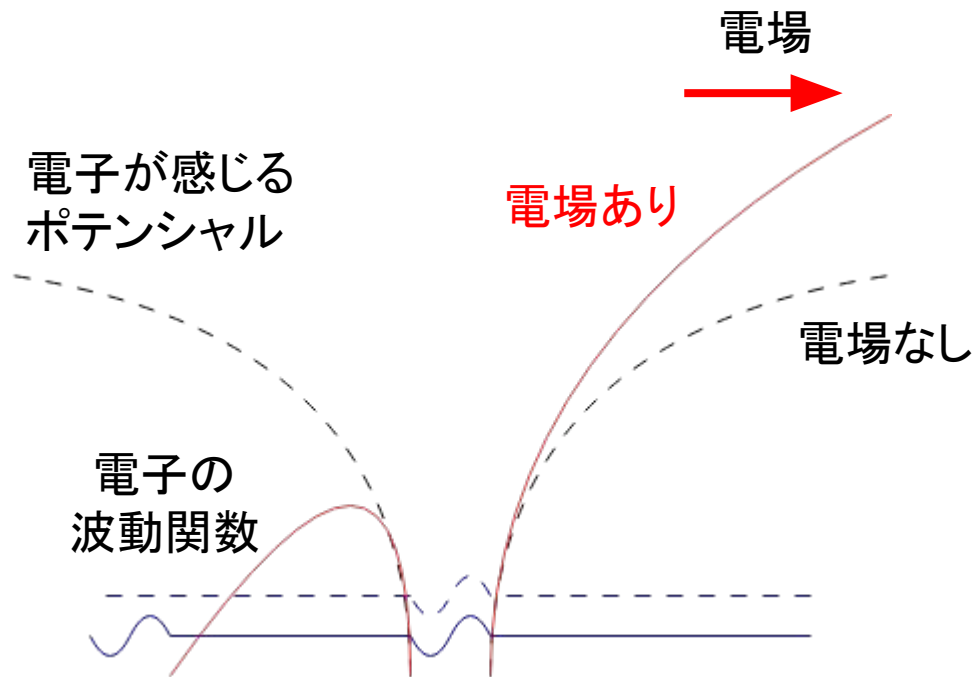


一様静電場中の水素分子イオンの シーガート状態: 例外点の配向角依存性

森下研究室

2433095 都築成玖

電場中の原子・分子



トンネルイオン化:
ハミルトニアンは非エルミートで
エネルギーは複素数になる
 $\varepsilon - i\Gamma/2$
 Γ :イオン化レート

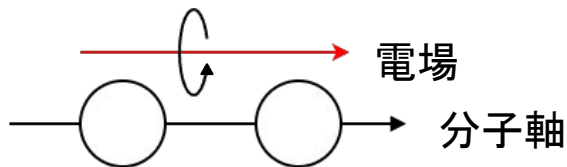
この際の原子・分子の状態は
原点で正則,
遠方で外向き波境界条件を満たす
シーガート状態[1]となる

電場中の原子・分子

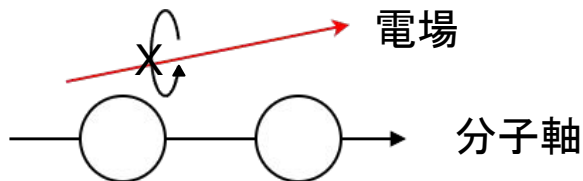
静電場 $\mathbf{F}=(F\sin\beta,0,F\cos\beta)$ が存在するハミルトニアンは、電場0のハミルトニアン H_0 を用いて

$$H = H_0 + \mathbf{F} \cdot \mathbf{r} = H_0 + Fx \sin \beta + Fz \cos \beta$$

$\beta=0^\circ$:分子軸まわりに対称 \rightarrow 特定の準位間のみ相互作用する



$\beta>0^\circ$:分子軸まわりに非対称 \rightarrow すべての準位が"混ざる"



水素分子イオン H_2^+

ディラック定数 \hbar 、素電荷 e 、電子質量 m_e 、クーロン定数 $1/4\pi\epsilon_0$ を基本単位とする原子単位系(a.u.)を用いる[2]

e.g.)電場1(a.u.) $\doteq 5.14 \times 10^{11} \text{V/m}$, レーザー強度1(a.u.) $\doteq 3.51 \times 10^{16} \text{W/cm}^2$

陽子は $(0,0,0)$, $(-R\sin\beta, 0, -R\cos\beta)$ に存在し, z 軸方向に電場が加わる

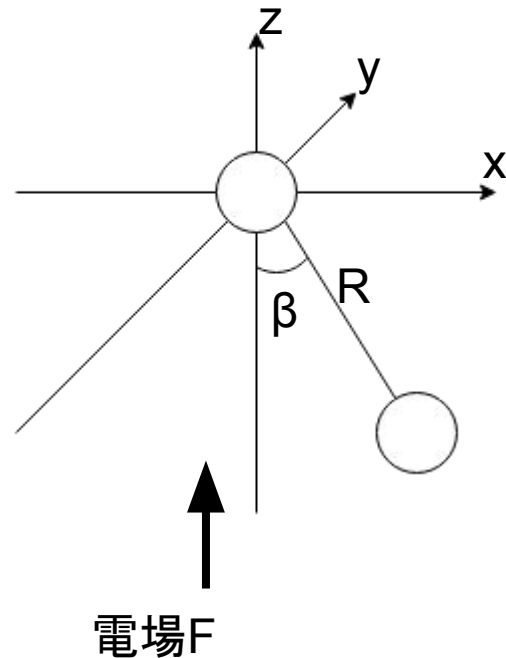
このときの H_2^+ の電子の時間に依存しないシュレーディンガー方程式は

$$\left\{ -\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{r}) + Fz \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

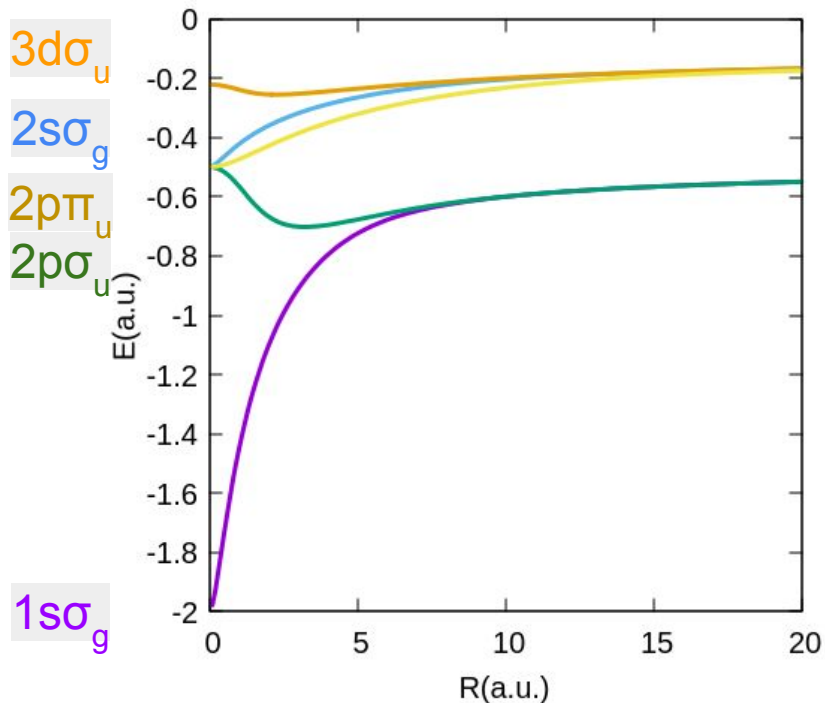
ただし $V(\mathbf{r})$ はソフトクーロンポテンシャル

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\sqrt{r^2 + \epsilon}} - \frac{1}{\sqrt{(x + R\sin\beta)^2 + y^2 + (z + R\cos\beta)^2 + \epsilon}}$$

で, $\epsilon=0.09$.



F=0の H_2^+ のエネルギー準位

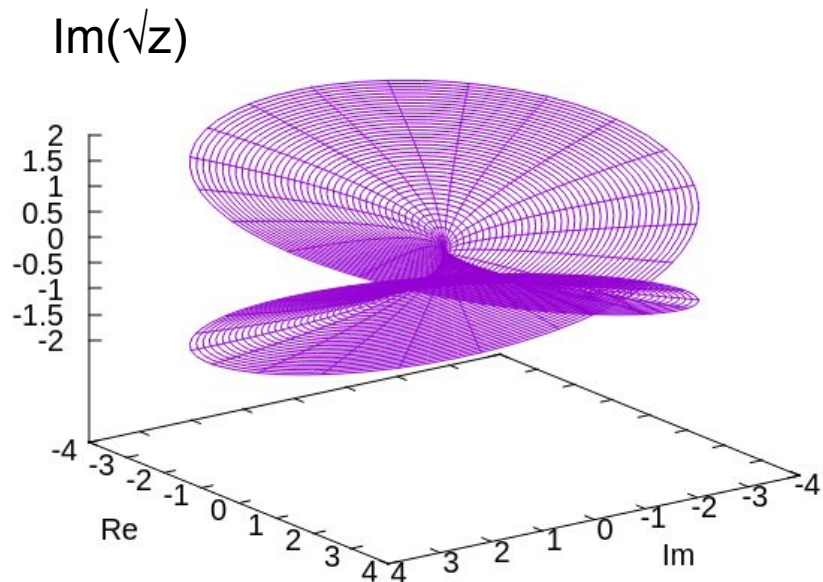


$R \rightarrow 0$ では電荷 $Z=2$ の水素様原子,
 $R \rightarrow \infty$ では水素原子+陽子になる

軌道名は

- ・それぞれの極限での軌道名
 - ・量子数 m を表す記号
 - ・波動関数の対称性
- によって決められる

多価関数と特異点



複素関数 $f(z)=\sqrt{z}$ は多価関数

$z=0$ の周りを1周すると

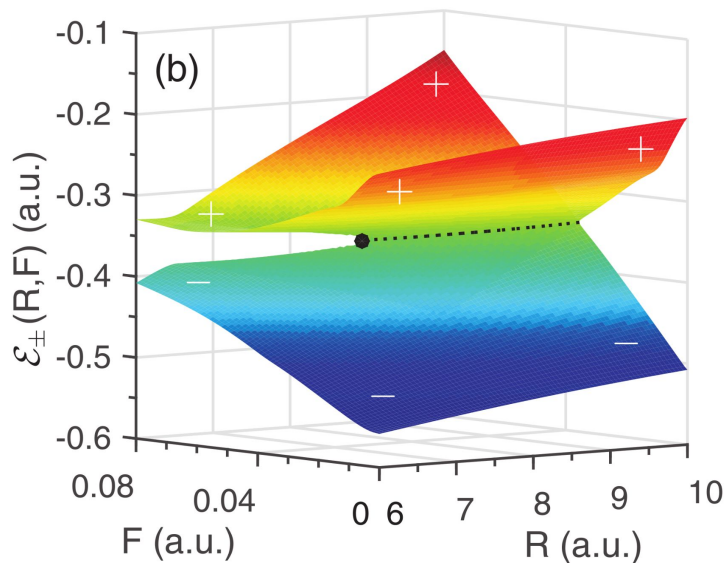
元の値に戻ってこない

→ $z=0$ は**分岐点**と呼ばれる

$z=0$ の周りを2周することで

元の値に戻って来る

先行研究:分子軸と平行な電場が加わった σ 状態の H_2^+ と例外点



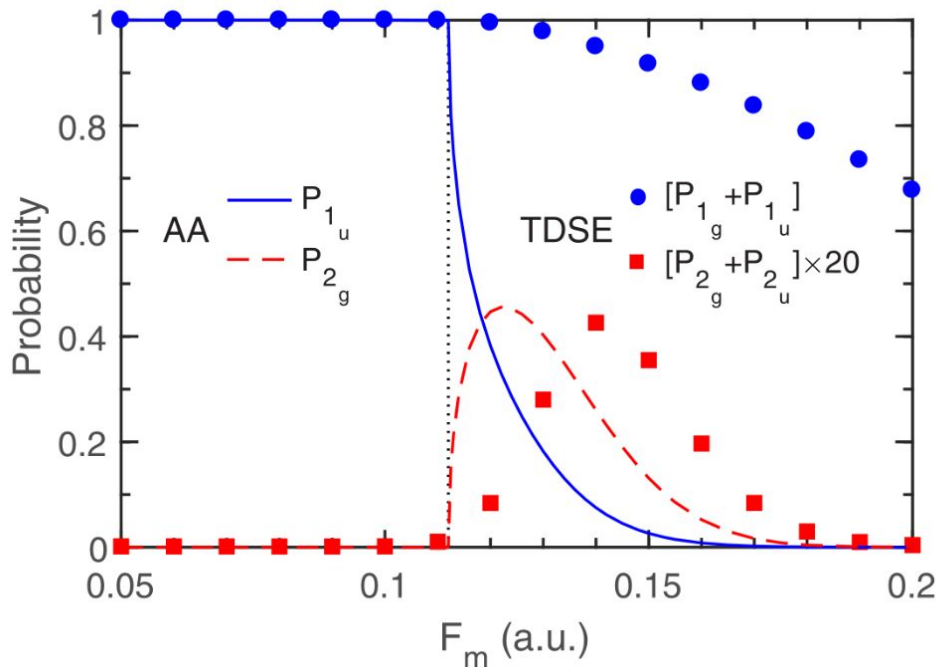
シーガート状態を用いて
分子軸に平行な方向に電場 F を加えた際の
 $2p\sigma_u$ と $2s\sigma_g$ のエネルギーを計算すると
 $(R, F) = (7.92, 0.0530)$ (a.u.)で
分岐点と同じ性質のものが見つかった[3]

パラメータ (R, F) は実数なので
分岐点ではなく**例外点**と呼ばれている

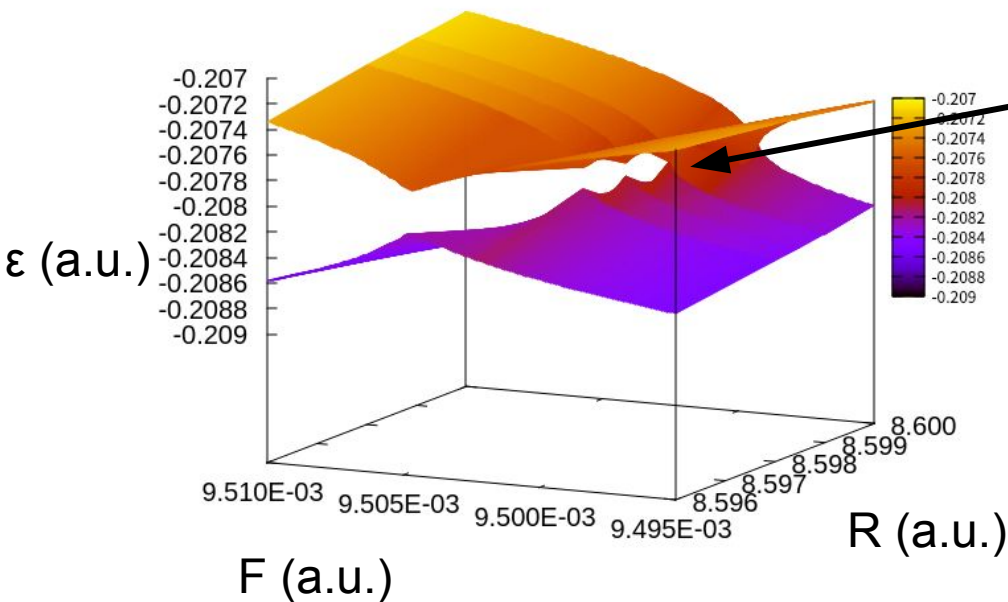
先行研究:レーザー電場中の H_2^+ の時間変化

終状態の確率密度が
断熱近似(AA)とTDSE計算で
それぞれ計算された

H_2^+ の核間距離は
レーザーとともに変化するが、
例外点に達するように
パラメータを調整することで
遷移を起こすことができる



分子軸と平行な電場が加わったの π 状態の H_2^+ : $3d\pi_g$ と $3p\pi_u$



σ 状態以外にも
量子数の異なる π 状態でも
 $(R, F) = (8.599, 9.501 \times 10^{-3})$ (a.u.)
に例外点が存在した

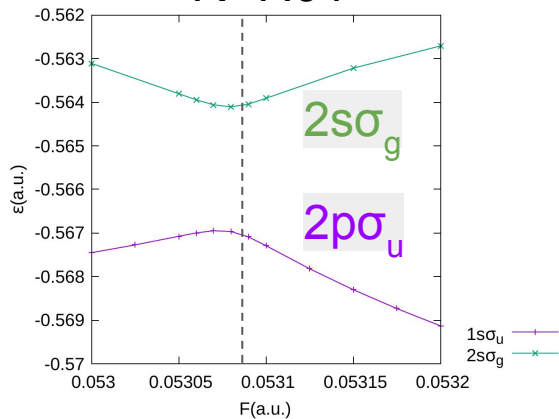
電場が分子軸と平行でない場合、
すべての準位と混ざるため
例外点の存在は保証されていない

既に見つかっている
 σ 状態の例外点について
電場と分子軸の角度 β を増やしながら
どう変化するかを調べる

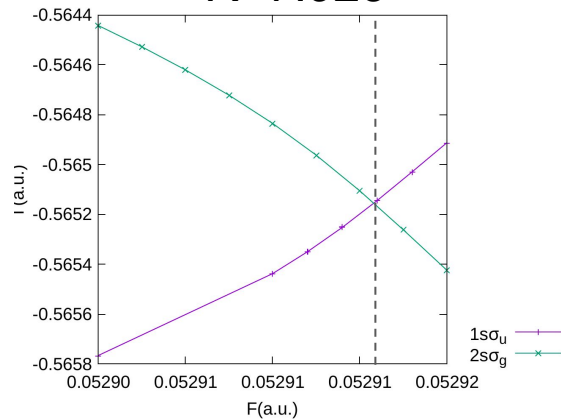
$\beta=0^\circ$

電場
分子軸

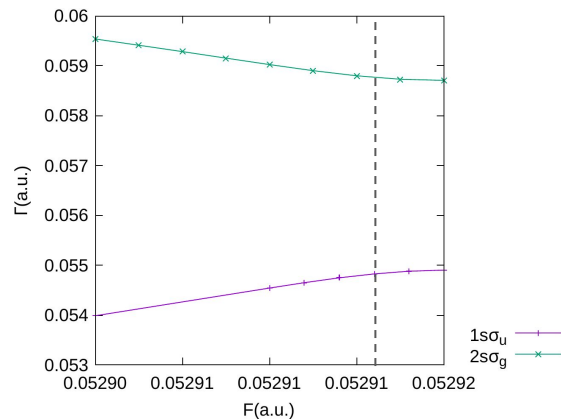
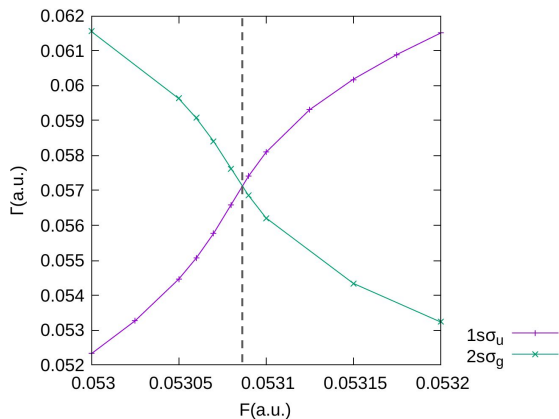
R=7.91

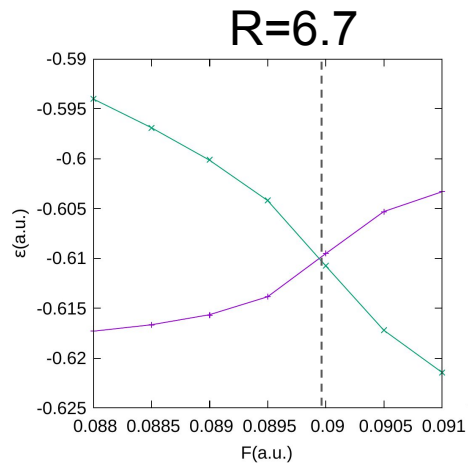
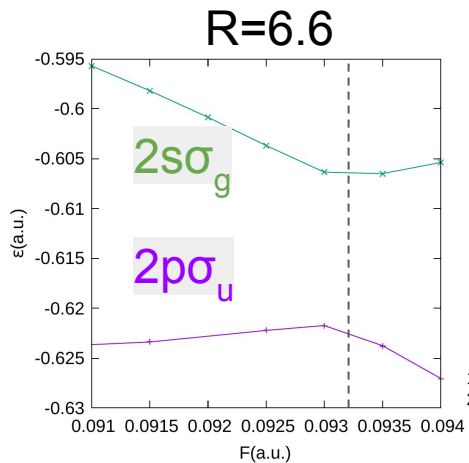
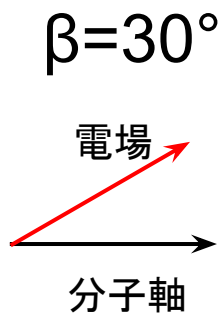


R=7.923



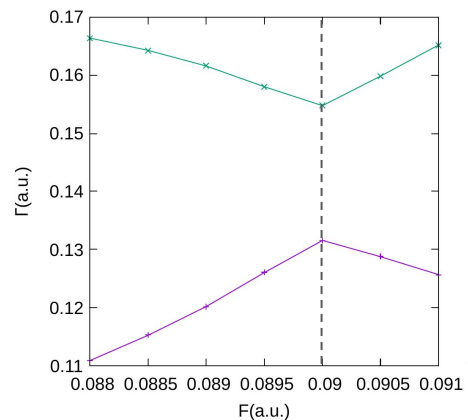
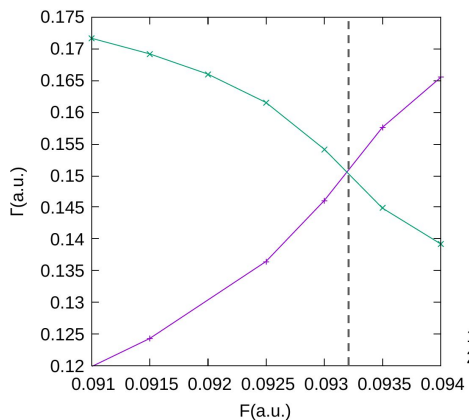
$\beta=0^\circ$
(R,F)=(7.92,0.053)に
例外点が存在



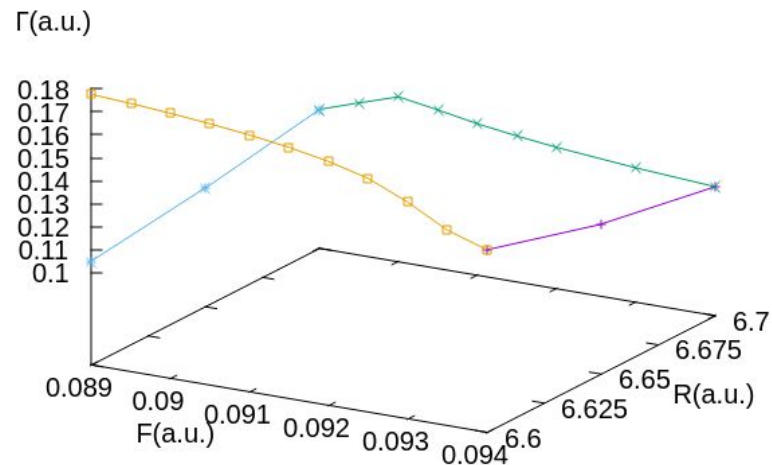
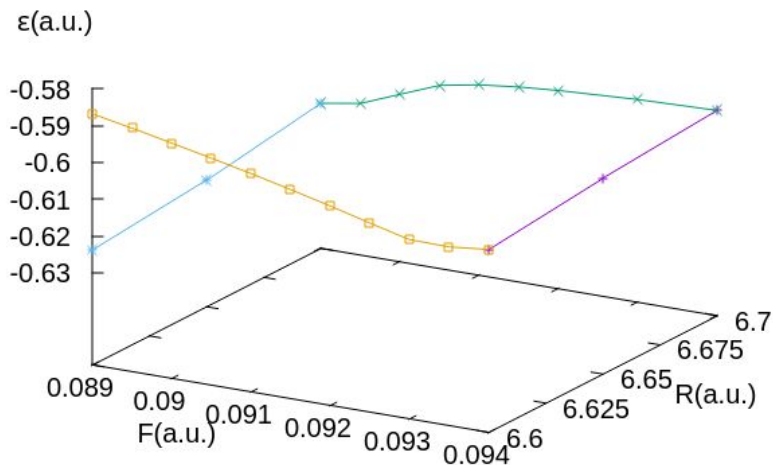


$\beta=0^\circ$
 (R,F)=(7.92,0.053)に
 例外点が存在

$\beta=30^\circ$
 (R,F)=(6.65,0.09)に
 例外点が存在



$\beta=30^\circ$ で例外点を1周するように(R,F)を変化させる

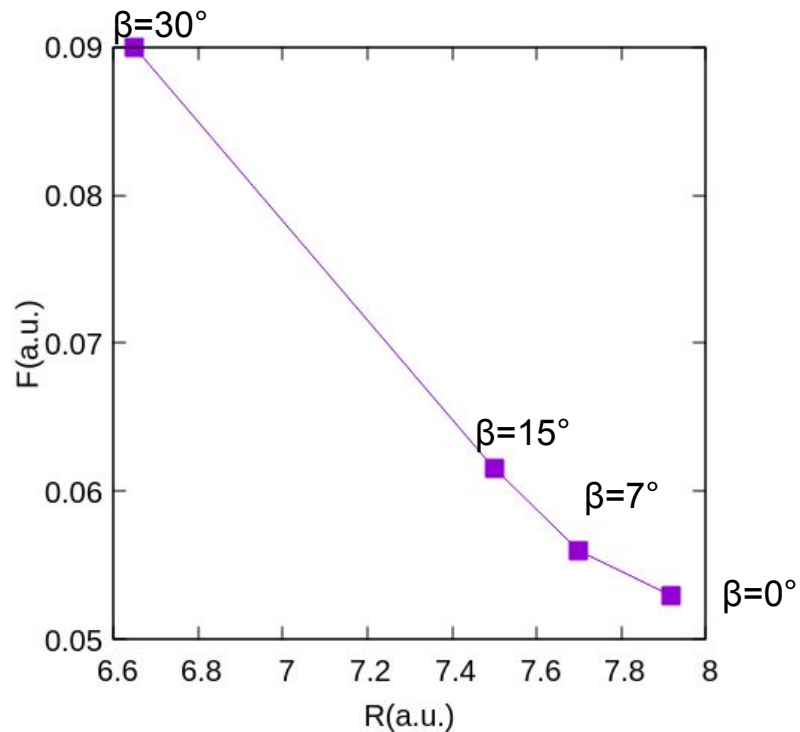


$(R, F) = (6.6, 0.089) \rightarrow (6.6, 0.094) \rightarrow (6.7, 0.094) \rightarrow (6.7, 0.089) \rightarrow (6.6, 0.089)$ と変化させた

→一周して元の状態に戻らなかった

→ $\beta=30^\circ$ においても例外点が存在した

見出された例外点の位置



β が大きくなるに連れ
Rが小さく, Fが大きい方向へ
例外点が移動した

まとめ

- ・電場と分子軸が平行でない場合においても、水素分子イオンの σ 状態に例外点が存在することが判明した.
- ・ポテンシャルは核の近傍で急激に変化しているため、収束したエネルギーを得るために必要な ϕ 方向の点数が β が増えるに従って増大していき、計算コストが高くなっていった
→核の近傍でのみ点を増やす柔軟なグリッド設定が必要

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]大森賢治(編). アト秒科学. 化学同人, 2015.

[3]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.