

○一谷 和弘, 高田 裕輔, 佐野 雅敏, 峠田 篤人, 杉森 公一¹, 長尾 秀実, 西川 清
(金沢大院・自然 ¹金城大)

【序】

近年, レーザー技術の進展により, フェムト秒オーダーの超短パルス高強度レーザーの開発や, 光パルス成形技法の発展により, 分子系の特定の状態に高効率で遷移させるなどの状態制御が可能になった. これまでの研究で, 古典・量子力学の両分野で最も重要な系の一つである調和振動子における波束の運動を自由自在に制御することを行った. 本研究では, OHラジカル分子を対象とし, 分子振動を Morse ポテンシャルで記述する. Morse 振動子は非調和性を有しているため波束は時間と共に容易に壊れてしまうが, Morse 系における波束の運動を自由自在に制御することを目的としてシミュレーションを行う. その際 Morse 系におけるコヒーレント状態の運動についての考察も行う.

【計算方法】

分子系における Morse 振動子のポテンシャルは,

$$V(x) = D(1 - e^{-a(x-r_e)})^2$$

で表される.

外場と分子系の相互作用である $W(x,t)$ は,

$$W(x,t) = -\mu(x)E(t)$$

$\mu(x)$ は双極子モーメント関数で, x で近似し, $E(t)$ は外場である.

時間発展演算子 $U(\Delta t)$ を,

$$U(\Delta t) = e^{-\frac{H}{h}\Delta t} \cong e^{-\frac{V+W}{2h}\Delta t} e^{-\frac{T}{h}\Delta t} e^{-\frac{V+W}{2h}\Delta t} + O((\Delta t)^3)$$

で近似した. この近似方法は, SOM(Split Operator Method)と呼ばれ, ノルムを保存する微小時間発展であるため, 時間依存ハミルトニアン等の複雑なハミルトニアンを精度よく取り扱うことができる.

図 1 は Morse 振動子系の自由時間発展している波束の運動である.

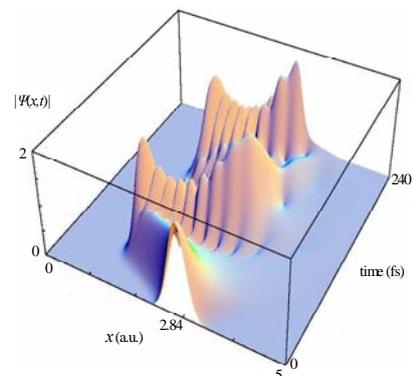


図 1 .Morse 振動子における波束の運動の例

【Morse 振動子系におけるコヒーレント状態】

調和振動子系のコヒーレント状態は以下の 3つの条件により生成される.

1. x と p の不確定性関係を最小にする.
2. 生成消滅演算子の固有状態である.
3. 変移演算子を系の基底状態に作用させる.

調和振動子系ではこれら 3つの条件を同時に満たすコヒーレント状態が存在する.

調和振動子系のコヒーレント状態は,古典的軌道に対応した運動を行い,しかも時間発展に対し波束の形が変わらない.

しかし,Morse 振動子系においてこの 3つの条件を同時に満たす状態は存在しないため,様々なコヒーレント状態の研究が行われてきた. 本研究ではこれらのコヒーレント状態の運動を

計算機シミュレーションにより解析する.

例は条件3を満たすコヒーレント状態[1]は以下のように与えられる.

$$\psi(x,t) = (1 - |\xi|^2)^k \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^{\lambda - \frac{1}{2} - n} e^{-\frac{y}{2}} L_n^{2\lambda - 2n - 1}(y) \xi^n .$$

ここで $y = 2\lambda e^{-a(x-r_e)}$, $\xi = -\tanh(\tau/2)e^{-i\phi}$, $a_n = \left(\frac{\Gamma(n+2k)}{n!\Gamma(2k)}\right)^{1/2} \left(\frac{a(2\lambda - 2n - 1)\Gamma(n+1)}{\Gamma(2\lambda - n)}\right)^{1/2}$,

$L_n^\alpha(x)$ は Laguerre の多項式である.

初期波束としてこのようなコヒーレント状態や固有状態に様々な条件でレーザーを照射した波束の運動を制御するシミュレーションを行った.

【結果】

一般に波束は、非調和性と外場の影響によって形がくずれてしまう. 図2の外場を Morse 振動子における基底状態に照射することで図3のように波束が容易にくずれてしまっていることが分かる. 以下に波束の形をくずさ

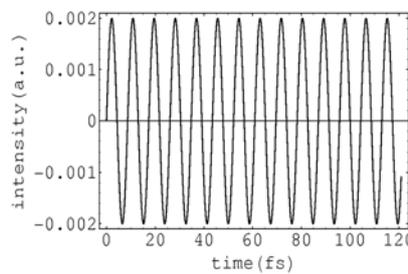


図2.外場

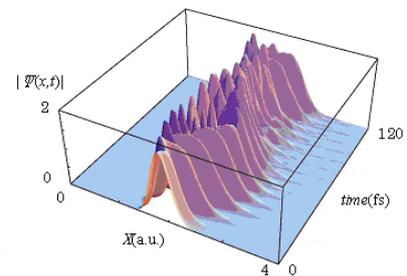


図3.波束の運動

ず,励起させた波束を基底状態に戻すシミュレーション結果を記載した.

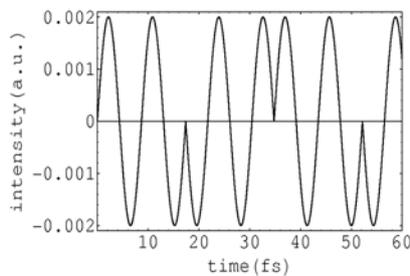


図4.外場

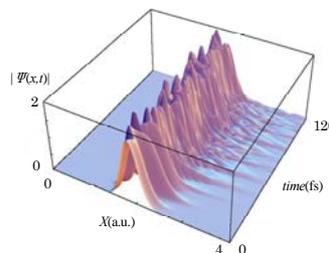


図5.波束の運動

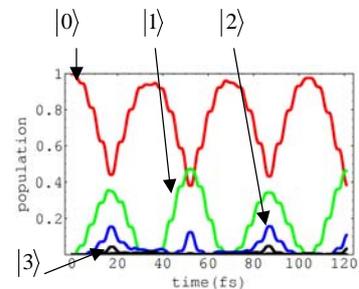


図6.ポピュレーション

初期波束として Morse 振動子の基底状態とする. 図4のように二周期ごとに逆位相にする定常波を照射した. 図5の波束の運動をみると波束は形を保たれたまま運動している様子が分かり,図6のポピュレーション結果から遷移した波束が基底状態に戻る運動を実現できたことが確認できた.

尚,より詳細なシミュレーション結果は当日報告する.

References

- [1] S.Kais and R. D. Levine, Phys. Rev. A, **41**, 2301 (1990)
- [2] Michael Martin Nieto and L. M. Simmons, Phys. Rev. A, **19**, 438 (1979)