

3P139 2次元水素原子における高次高調波の光量子制御

(金沢大院・自然) ○谷口 峻一, 佐野 雅敏, 峠田 篤人, 長尾 秀実, 西川 清

[序]

現在、レーザー技術の進展の鍵として注目を浴びているものの1つに、高次高調波の生成によるアト秒オーダーのレーザーパルスの生成がある。高次高調波とは、超短パルス高強度レーザー(振動数 ω とする)を原子や分子に照射したときに発生する短波長光のことで、その振動数が $n\omega$ (数十~数百倍にも及ぶ)の高調波を高次高調波という。原子の持つクーロン電場に匹敵する高強度のレーザーパルスを原子にあてると、電子の感じるクーロンポテンシャルが歪み、原子内に束縛された電子波動関数の一部がレーザー電場とクーロンポテンシャルの作るバリアを抜けてイオン化する(トンネルイオン化)。イオン化した電子波束はレーザー電場の周期によって制御され、周期ごとに軌道の向きを変えて元のイオン核に衝突する(電子の再衝突)。この間、電子波束はエネルギーを吸収し、そのエネルギーを放出することで、高次高調波を発生する。

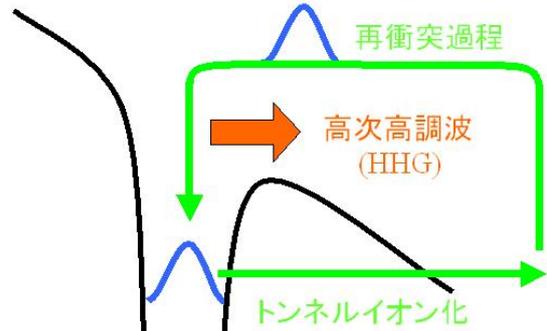


図1. 電子のトンネルイオン化と電子の再衝突過程

[研究目的]

本研究では2次元水素原子を対象とし、高強度のレーザーパルスを用いることで、ポテンシャル内の電子波動関数を制御し、レーザー電場によって得たエネルギーを放出しながら元のポテンシャルの束縛状態に戻っていく様子を確認する。また、そのとき生成される高次高調波の発生とその制御のシミュレーションを試みる。

[計算方法]

(1) 固有関数の求め方

一般的に2次元での系のハミルトニアン H_0 は、運動エネルギー T_x, T_y とポテンシャルエネルギー V_{xy} の和 $H_0 = T_x + T_y + V_{xy}$ で定義される。今回使用するポテンシャルは2次元水素原子ポテンシャル V_{xy} であるが、この系の固有エネルギー、固有ベクトル(基底状態, 励起状態)は、FGH (Fourier Grid Hamiltonian)法[1]で求めた。ここで、FGH法によるハミルトニアン H_{ijkl} は、次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \langle i, j | H | k, l \rangle &= \langle x_i, y_j | H | x_k, y_l \rangle \\ &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left\{ \frac{2}{N_x} \sum_n T_n \cos \left[\frac{2\pi}{N_x} n(i-k) \right] \delta_{j,l} + \frac{2}{N_y} \sum_n T_n \cos \left[\frac{2\pi}{N_y} n(j-l) \right] \delta_{i,k} + V(x_i, y_j) \delta_{i,k} \delta_{j,l} \right\} \end{aligned}$$

$$\left(T_n = \frac{\hbar^2 \Delta k^2}{2m} n^2 \right) \quad \begin{array}{l} N_x, N_y : \text{座標空間の刻み数(基底の数)} \\ \Delta x, \Delta y : \text{座標空間の刻み幅} \quad \Delta k : \text{運動量空間の刻み幅} \end{array}$$

このハミルトニアン行列を対角化することで、固有値と固有ベクトルを精度よく求めることが出来る。

(2) 2次元SOM法の開発と時間依存シュレディンガー方程式

外場と電子の相互作用 W は、 $W = -\mu E$ として与えられ、 μ は双極子モーメント、 E は外場である。外場を考慮したハミルトニアンを $H = H_0 + W = T_x + T_y + V_{xy} + W$ とすると、時間依存のシュレディンガー方程式は、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle = (T_x + T_y + V_{xy} + W) |\Psi(t)\rangle$$

と書ける。この方程式の解は、時間発展演算子 $U(\Delta t)$ を用いて、

$$|\Psi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t) |\Psi(0)\rangle$$

と書ける。ここで、 $|\Psi(\Delta t)\rangle, |\Psi(0)\rangle$ はそれぞれ微小時間後の波束と初期波束である。

時間発展演算子 $U(\Delta t)$ は、

$$U(\Delta t) \cong e^{-i\frac{H}{\hbar}\Delta t} = e^{-i\frac{V_{xy}+W}{2\hbar}\Delta t} e^{-i\frac{T_x+T_y}{\hbar}\Delta t} e^{-i\frac{V_{xy}+W}{2\hbar}\Delta t} + O(\Delta t^3)$$

と、近似する。この近似方法は、SOM (Split Operator Method) [2] と呼ばれ、ノルムを保存する微小時間発展である為、時間依存する相互作用等の複雑なハミルトニアンを精度よく取り扱うことが出来る。

[結果]

(1) 高強度レーザーパルスによる電子波束の運動

図2のような高強度のレーザーパルスを用いることで、電子波束がレーザーパルスの周期にそって運動する様子(図3)を確認できる。ここで、図3の縦軸は電子波束の座標の期待値をあらわしている。また、図4から、レーザーパルスの照射により電子波束が徐々にエネルギーを吸収していく様子を確認できる。

(2) 2次元ポテンシャル内での電子波束

2次元ポテンシャル内では図5のような電子波束を用いてシミュレーションを行った。この電子波束は、2次元水素原子におけるクーロンポテンシャルの基底状態の波動関数である。

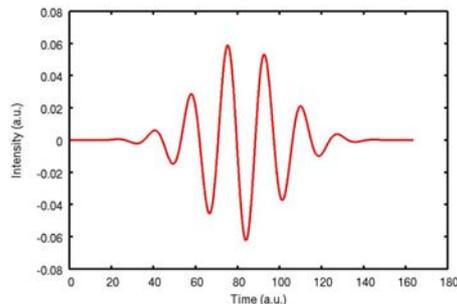


図2. レーザーパルス

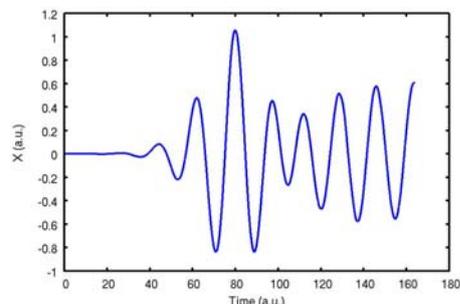


図3. 電子波束の座標の期待値 $\langle X \rangle$

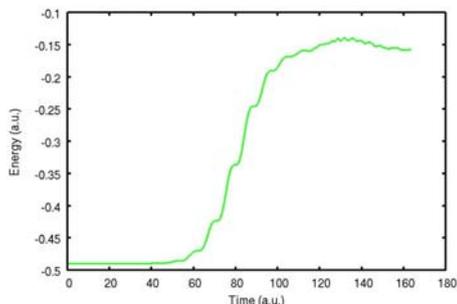


図4. 電子波束のエネルギー

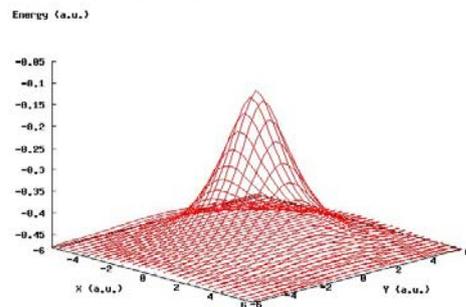


図5. 2次元ポテンシャル内での電子波束

[参考文献]

- [1] C. Clay Marston and Gabriel G. Balint-Kurti, J. Chem. Phys., 91, 3571-3576, (1989)
- [2] M. D. Feit and J. J. A. Felck, J. Chem. Phys., 78, 301-308 (1983)