

強レーザー場における水素分子のイオン化に関する理論的研究

○西 孝哲¹, Erik Lötstedt¹, 山内 薫¹

¹東大院理

A theoretical study on single ionization of a hydrogen molecule in an intense light field

○Takanori Nishi¹, Erik Lötstedt¹, Kaoru Yamanouchi¹

¹Department of Chemistry, School of Science, The University of Tokyo, Japan

【Abstract】 In order to solve efficiently the time-dependent Schrödinger equation describing ionization processes of atoms and molecules in an intense laser field by a grid method, we developed a symmetry adopted grid (SAG) method for single ionization, in which the grid space is reduced significantly by taking advantage of the symmetry of the electronic wave function of the system. We studied single ionization of a hydrogen molecule by the SAG method, and confirmed that a photoelectron spectrum can be obtained with a grid space 17 times smaller than the conventional grid method, in which the symmetry of the wave function is not taken into account. By comparing the photoelectron spectrum calculated using the SAG method with a reference spectrum calculated using the conventional grid method, we estimated the relative error in the photoelectron spectrum to be smaller than 2%. The error was considered to originate from the neglect of the double ionization in the SAG method.

【序】 強レーザー場における原子や分子の光イオン化過程をグリッド法によって計算する場合は、生成した光電子の波束が3次元空間の広い範囲を動くために膨大なメモリーが必要となる。一方で、直線偏光のレーザーを用いた場合、粒子の運動方向が、レーザー電場の偏光方向に偏ることを反映し、粒子の運動をレーザーの電場方向に限定した1次元モデルによって、多光子イオン化や越閾イオン化の光電子スペクトル[1-3]、高次高調波発生による光子エネルギーのスペクトル[3]のピーク位置や電場強度依存性を定性的に再現できる。しかし、次元を1次元に落とした場合でも、イオン化後の光電子波束の時間発展を長時間にわたって計算する場合には、グリッド空間のサイズを大きくする必要があり、それに伴いメモリーのサイズも膨大になってしまう。本研究では、グリッド空間をさらに大幅に節約することを目的として、電子波動関数の対称性を利用し、1重イオン化に特化した symmetry adopted grid (SAG) 法を考案した。そして、水素分子の光イオン化過程の波束計算を行い、光電子スペクトルが、通常グリッド法を用いて計算した場合と比較して、相対誤差 2%以下の範囲で一致することを示した。

【方法】 水素分子 H_2 は、2つのプロトンと2つの電子から構成されるので、4粒子系である。本研究ではこの4粒子が1次元に制限されているものとして扱い、4粒子が動く直線方向が、直線偏光の強レーザーの電場方向に一致すると仮定した。2つの電子の座標を x, y とすれば、電子の位置は2次元平面で表せるので、2つの電子の運動は、図1に示す2次元グリッド

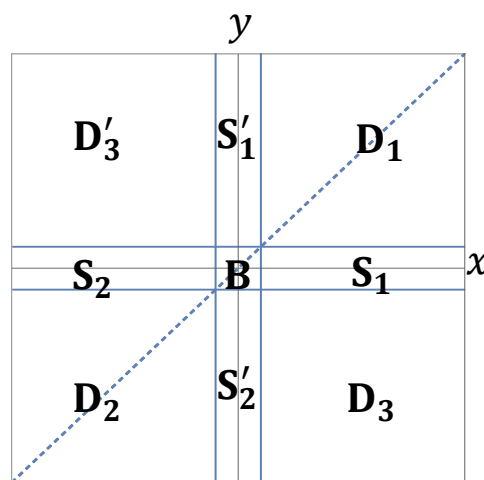


Fig.1. Grid space. In the domain B both electrons are bound. The domain S represents single ionization and the domain D represents double ionization.

面内での波束として記述できる。なお、 H_2 は1重項にあるものとし、1重イオン化のみを考える。領域Sは1重イオン化、領域Dは2重イオン化を表している。1重項の電子波動関数は空間座標の交換に対して対称である。すなわち、図1の領域S1と領域S1'、領域S2と領域S2'はそれぞれ等価である。したがって、領域S1と領域S2に加えて、束縛状態に対応する領域Bにおいて波束計算を行えば十分である。波動関数の対称性から、 y 方向の微分演算と x 方向の微分演算は等価であるため、領域Bにおける y 方向の微分演算は行わず、 x 方向の微分演算の結果で置き換えた。

SAG法との比較のため、領域Dも含み、かつ対称性を考慮しない通常のグリッド法を用いた計算を行った。この場合、波束計算は、 $|x|, |y| \leq 500$ a.u.の領域内で行い、領域Sと領域Dの境界を $x, y = \pm 30$ a.u.に設定し、波束計算の後、領域Sと領域Bの波束を取り出して光電子スペクトルを求めた。一方、SAG法の場合には、3つの領域S1、S2、Bのみを扱えばよいので、グリッド空間の範囲は、 $|x| \leq 500$ a.u.、 $|y| \leq 30$ a.u.であり、必要なメモリーは通常のグリッド法に比べて約17分の1に節約される。また、光電子波束の時間発展をさらに長時間計算する場合、 x 方向のグリッドのみを拡大させればよいので、必要なメモリーのサイズは、2次元グリッド平面のサイズを $L \times L$ とすると、 L に対して線形に増加するだけで済むが、通常のグリッド法では L^2 に比例する。

【結果と考察】

水素分子の基底状態と強レーザー場(40 nm、20 サイクル、 10^{15} Wcm $^{-2}$)を相互作用させ、さらに7257 as時間発展させた波束の x 方向の空間分布 $\rho(x) = \int dy |\Psi(x, y)|^2$ を図2に示す。通常のグリッド法を用いて計算した波束のうち、領域SとBのみを取り出した場合(黒)と、本手法を用いた場合(赤)の差は非常に小さく、領域Sでの相対誤差は2%以下である。

図2に示した時刻において、領域Sの波束を x についてFourier変換し、光電子波束のエネルギースペクトルを計算した結果を図3に示す。SAG法と通常のグリッド法の相対誤差は、光電子のエネルギーが0.05 a.u.から0.30 a.u.、0.57 a.u.から0.80 a.u.の範囲で2%以下である。2つのピークのうち、0.65 a.u.付近のものは、 $H_2 \rightarrow H_2^+(1s\sigma_g) + e^-$ に、0.13 a.u.付近のものは $H_2 \rightarrow H_2^+(2p\sigma_u) + e^-$ に対応する。このように、イオン化に伴って電子状態が励起される場合においても、2つの電子が領域Sの内部に含まれている限りは、本手法を適用することができる。

以上のように、光電子波束と生成したイオンの束縛電子の波束が領域Sに含まれる限り、光電子スペクトルを、従来のグリッド法との相対誤差が2%以下の範囲で計算できることが示された。

【参考文献】

- [1] U. Schwengelbeck and F. H. M. Faisal, *Phys. Rev. A*, **50**, 632 (1994).
- [2] M. Lein, T. Kreibich, E. K. U. Gross, and V. Engel, *Phys. Rev. A*, **65**, 033403 (2002).
- [3] J. H. Eberly, Q. Su, J. Javanainen, K. C. Kulander, B. W. Shore, and L. Roso-Franco, *Journal of Modern Optics*, **36**, 829-855 (1989).

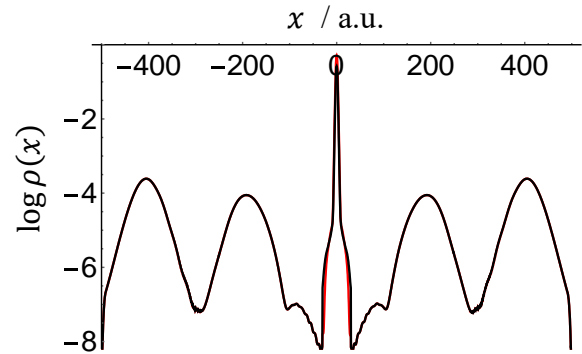


Fig.2. Spatial distributions of the wave packet along the x direction obtained by the SAG method (in red) and by the conventional grid method (in black) at the propagation time of 7257 attoseconds after the interaction with the laser pulse.

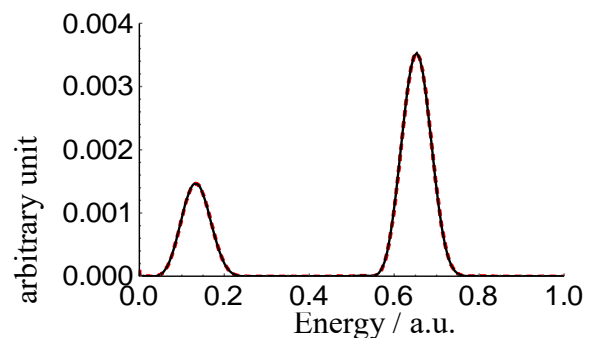


Fig.3. Photoelectron energy distributions obtained by the SAG method (in red) and by the conventional grid method (in black).