

強光子場中に於ける原子分子 のイオン化過程の第一原理計算

(筑波大物理) ○乙部智仁、矢花一浩

大強度レーザーと原子分子の相互作用の研究は、原子分子の光に対する非線形な応答を知ることが出来るという点からも、多価イオン源や軟X線源といった応用面からも非常に興味深い。

我々は現在、時間依存密度汎関数法 (TDDFT) の基礎方程式である時間依存 Kohn-Sham 方程式 (TDKS) を実時間実空間法を用いて解く事により、強レーザー場と原子分子の相互作用を第一原理的に記述及び理解することを目指している。これまでに、静電場中での原子分子のトンネルイオン化率の計算を行い実験を定性的に良く再現する事を確認し、**HOMO** の対称性に由来するイオン化率の方向依存性の重要性を知ることが出来た。

近年レーザー技術の発展により、5fs 程度のパルスレーザーの形成が可能となった。このような非常に短いパルスレーザーに於いては、パルスのピークに対するレーザーの位相が大きな意味を持つてくる。(図1)

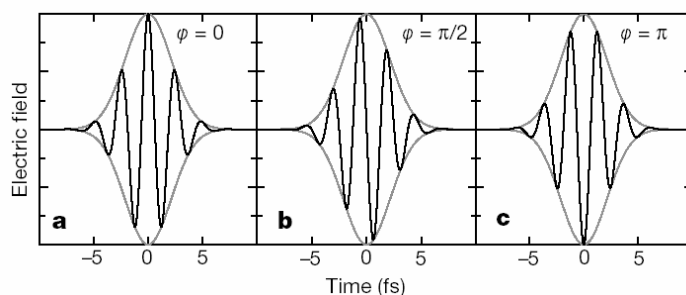


図1. パルスに対するレーザーの位相の違いによる電場のピークの強さ及び方向の違い。

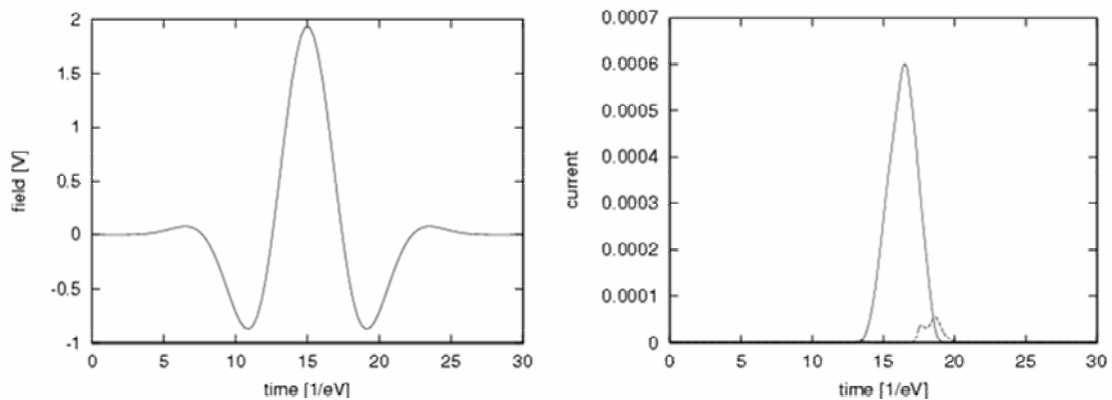
さらに最近では、パルスに対するレーザーの位相をコントロールすることが可能になってきた。これにより、レーザーの位相操作による原子・分子のアト秒領域でのコントロールや高次高調波発生を利用した軟X線のアト秒パルスの生成等、新たな研究分野が期待されている。

今回我々は TDKS 方程式を実時間実空間方で解くことで 5fs 程度のパルスレーザーに於けるイオン化過程の位相依存性を調べた。

図2は Kr 原子にレーザーのピーク強度 $5 \times 10^{13} [\text{W}/\text{cm}^2]$ 、パルス幅約 5fs、パ

ルスに対する光の位相が 0 となる様な円偏光したパルスレーザーをあてた時、原子から放出される電子の流れを示したものである。**a)**に位相 0 の時の z 軸方向の電場、**b)**にレーザー場中での **Kr** 原子から放出された電子 z 軸の正方向への流れと負方向への流れを図示した。実線が負方向であり、パルスがピークの時に放出された電子に対応している。一方破線は正方向の電子の流れであり、パルスのピークでの電場のピークの前後に現れる比較的弱いピークでの電子の放出に対応している。図 2 **b)**から、明らかに位相の効果によるイオン化の方向依存性がある事が分かる。これはこれまでに行われた実験の結果を定性的に支持する結果になっている。

このように我々の計算法は強レーザー場中での原子分子の応答を記述する為の非常に強力な手法である事が分かる。



a)

b)

図2 a) レーザーピーク強度 $5 \times 10^{13} [\text{W}/\text{cm}^2]$ 、波長 800[nm]、パルス幅約 5fs のパルスレーザーの z 軸方向の電場強度。b) 位相 0 の時の z 軸の正方向の電子の流量（実線）と負方向の流量（破線）の時間変化。