

光子場は振動電場と考えることができる。荷電粒子は電場に応じて振動するが、電子と原子核では質量が大きく異なるため、振動の仕方も異なってくる。その結果、電子が原子核から感じるポテンシャルは、光子場によって変化する。近年、電子が原子核から受けるクーロン場に匹敵する程の電場強度を持つレーザーが利用可能となった。そのようなレーザーによる強光子場中で、電子雲は大きく歪み、分子は新しい性質を持つようになると考えられる。本研究では、光子場に誘起された軌道混成によってヘリウムが共有結合を形成し、分子振動できる程度のイオン化寿命を持つ事、すなわち、強光子場中に共有結合性ヘリウム分子が存在することを報告する。

【KH 近似電子状態計算による He_2 のポテンシャル曲線】Kramers-Henneberger (KH) 座標系は、光子場に駆動されて振動する電子の位置に原点を取る座標系である。この座標系での時間平均ハミルトニアンに基づく近似は、振動電場の角振動数が大きい場合の強光子場中の電子系の記述に有用である (KH 近似)。KH 近似の電子状態計算による He_2 基底状態のポテンシャルエネルギー (PE) 曲線を図 1 に示した。振動電場は分子軸 (z 軸) に平行に印加した。 α は光子場強度を表す指標 (Ponderomotive 半径) である。 $\alpha = 0.5$ は、光子エネルギー $h\nu$ が 2 Hartree であるとき、光子場強度 140.4 PW/cm^2 に相当する。図から分かるように、強光子場下で He_2 は結合を形成する。 He_2 の基底状態の電子配置は、核間距離によらず $(1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2$ であり、結合形成の原因は分子軌道の性質変化にあることが分かる。

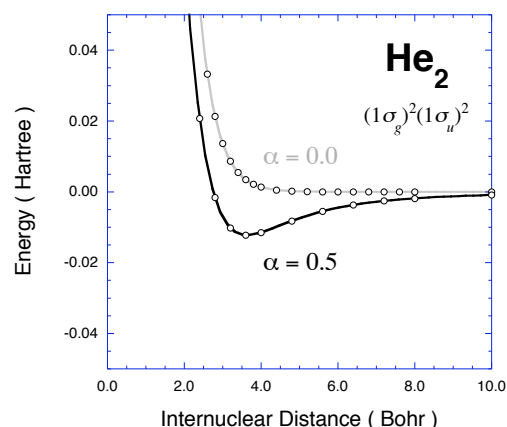


図 1. 強光子場中の He_2 のポテンシャル曲線

【強光子場中での混成と分子軌道】 $1\sigma_g, 1\sigma_u$ 分子軌道は、光子場がなければ、ほぼ $1s$ 原子軌道のみからなる。一方、強光子場下では $2p_z$ 原子軌道が強く混入していることが分かった。元来、He 原子の軌道エネルギーは、 $\epsilon_{1s} \ll \epsilon_{2s,2p}$ であるが、強光子場下では、 $\epsilon_{1\sigma_g(1s)} \sim \epsilon_{1\sigma_u(2p_z)} < \epsilon_{2\sigma_g(2s)}$ となる。このために $1s$ - $2p_z$ の軌道混成が起こったと解釈できる (図 2a)。これは偏光方向へ電子が揺り動かされることの量子力学的な表現そのものである。強光子場下の分子軌道は、このような混成軌道の線形結合となる。その結果、 $1\sigma_g$ 分子軌道の電子密度が核間領域に集中して結合性が強くなる一方、 $1\sigma_u$ 分子軌道の核間領域の電子密度は下がり、反結合性軌道というよりむしろ非結合性軌道となる (図 2b)。このため、 He_2 も強光子場中では化学結合を形成することになる [1]。

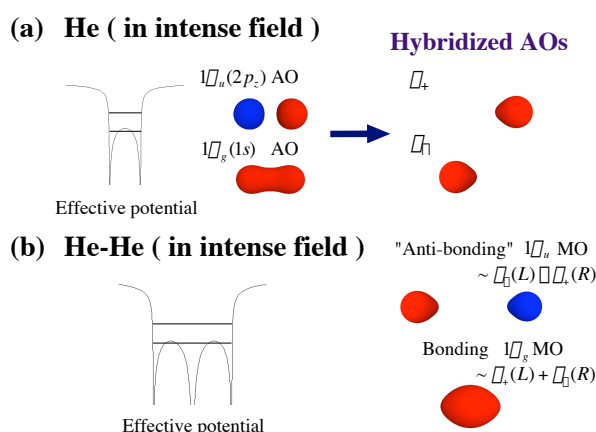


図 2. 強光子場中での軌道混成と分子軌道

【現実的なレーザー条件下での共鳴エネルギーとイオン化寿命】以上の議論は KH 近似に基づいている。KH 近似は光子場の振動数が無限大の極限でのみ正確である。振動数が有限であればイオン化が起こる。He₂ 分子の存在の現実的な可否を議論するには、イオン化に対する寿命を見積もる必要がある。Floquet 理論と McCurdy-McNutt の安定化法 [2] を組み合わせて、He₂ の共鳴エネルギーおよび寿命を評価した。電子配置として基底電子配置および全ての一電子励起配置を考慮した。光子エネルギーは 2 Hartree、光子場強度は 140.4 PW/cm² とした。得られた共鳴エネルギーを図 3a に示す。比較のために KH 近似の PE 曲線（図 1）も灰色で示してある。光子エネルギーが比較的小さいために KH 近似からのずれは大きい、本レーザー条件下でも PE 曲線は束縛的になる。平衡核間距離近傍の調和近似による分子振動の周期 τ_{vib} は 3.7 fs である。一方、イオン化寿命（図 3b）は平衡核間距離付近で最も短くなるものの、10 fs 程度ある。局所的に考えれば、 $\tau_{\text{vib}} > \tau_{\text{ionz}}$ であるので、振動状態は量子化されるものと期待される。

【強光子場中の He₂ の振動固有状態】実際に、（イオン化減衰の効果を含んだ）複素数の PE 曲線上にできる振動固有状態を求めたのが図 4 である。図の左側に準位間隔を、右側に準位幅を添えた。8 つの振動固有状態が存在する。いずれの状態についても準位幅は準位間隔よりも小さく、振動状態は量子化される。特に、基底状態付近では準位間隔は準位幅の 3 倍程度あり、これはヘリウム分子がイオン化する前に 3 回程度振動できることを意味している。つまり、ヘリウムは強光子場中で準安定ながらも「分子として存在する」と言う事ができるのである。

【参考文献】

- [1] T. Yasuike, K. Someda, *J. Phys. B* **37** (2004) 3149.
- [2] C. W. McCurdy and J. F. McNutt, *Chem. Phys. Lett.* **94** (1983) 306.

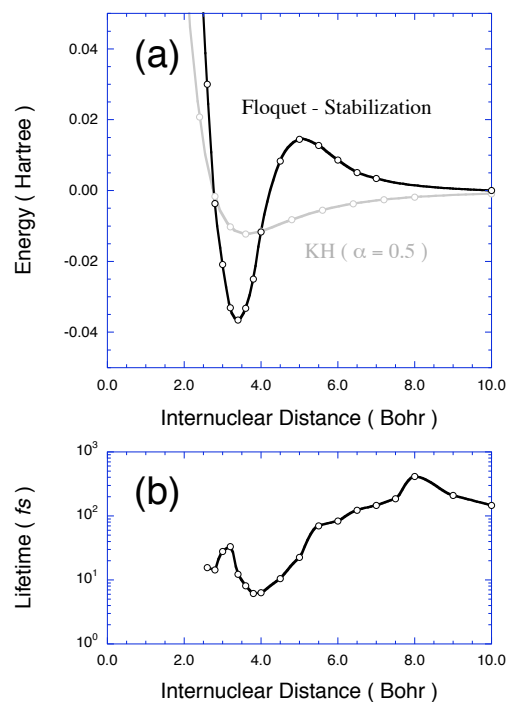


図 3. 強光子場中の He₂ のエネルギーと寿命

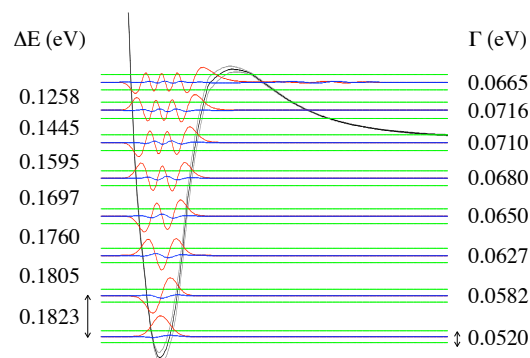


図 4. 強光子場中の He₂ の振動固有状態