

3P090 中性子コンプトン散乱によるサブフェムト秒核ダイナミクスの理論的研究

(東北大院理¹・ベルリン自由大学²) 須藤雅彦¹, 田名部誠一¹, 河野裕彦¹,
藤村勇一¹, Joern Manz²

【序】近年、電子ダイナミクスはアト秒スケールで直接観測されるようになってきている。核は電子に比べ非常に重いため、アト秒スケールでは、核は止まっていると考えられている。だが最近、高速中性子散乱によって、アト秒スケールで分子内の陽子が動いていることを示唆する現象が Dreismann らによって発見された¹⁾。そこで我々は、中性子が衝突したモデル分子のダイナミクスを計算した。モデル分子として、水素分子イオンと水素分子の2種を考えた。水素分子イオンでは基底電子状態ポテンシャルだけを用いた1次元計算(核間距離だけを自由度とする)と電子の分子軸方向の自由度も取り入れた2次元計算を行った。また、水素分子モデルでは2つの電子座標と1つの核座標をもつ3次元計算を行った。ただし、電子運動は分子結合軸方向だけを考える。

【結果】中性子が核と衝突した時刻を0として水素分子イオンの核波束を計算した。Fig.1とFig.2は、核波束の時間発展の計算結果である。横軸が核間距離、縦軸が時間になっている。核に与えた運動量は $\pm 16a_0^{-1}$ である。ここで a_0 はボーア半径である。この結果はほぼ1次元計算の結果と一致していることが確かめられた。これは、この運動量では電子-核相関を引き起こすほどのエネルギーに達していないためだと考えられる。実際、電子はほとんど励起していなかった。

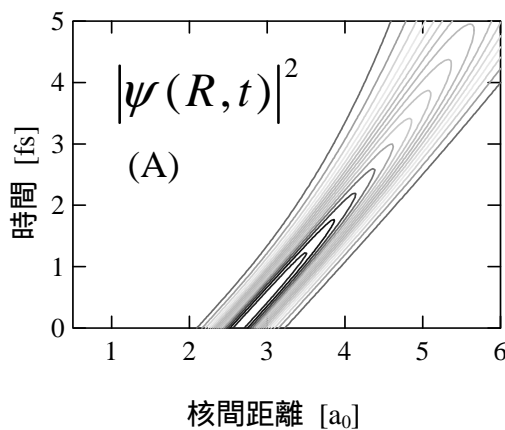


Fig.1 初期運動量 $k=16a_0^{-1}$ を与えたときの核波束の時間発展。

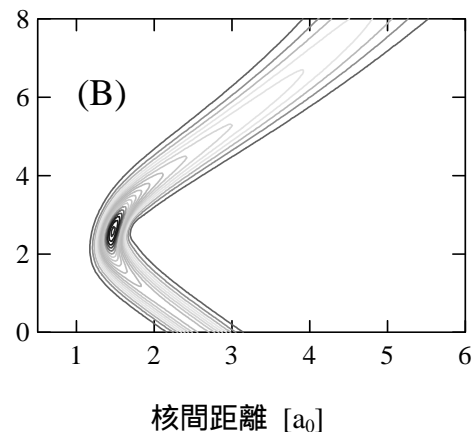


Fig.2 初期運動量 $k=-16a_0^{-1}$ を与えたときの核波束の時間発展。

また、衝突によって与えられたエネルギーをより詳細に調べるためにエネルギースペクトルを計算した。エネルギースペクトルは次のようにして求めた。まず、波動関数

$$\tilde{\psi}_i(R, t) = \exp(-i\hat{H}t) \exp(ik_i(R - R_0)) \psi_0(R)$$

$\psi_0(R)$: 初期波束 $R_0 = 2.6[a_0]$

の自己相関関数

$$C_{ij}(t) = \langle \tilde{\psi}_i(0) | \tilde{\psi}_j(t) \rangle$$

を求める。 i と j としては運動量が正のもの(核の結合が伸びる方向)と負のもの(核の結合が縮む方向)があり、それぞれを A、B とする。この自己相関関数からエネルギースペクトル $S(\omega)$

$$C_{ij}(\omega) = \text{Re} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} C_{ij}(t)$$

$$S(\omega) = \sum_{ij} C_{ij}(\omega)$$

を求めた。

自己相関関数の 2 次元計算結果を Fig.3 に示す。横軸は時間である。これも 1 次元計算のものとはほぼ一致した。 C_{BA} は重なりをもたないため 0 である。エネルギースペクトルの計算結果を Fig.4 に示す。これは横軸がエネルギーになっている。今回、核のダイナミクスを観察することはできたが、電子-核相関はほとんどみられなかった。それは核に与えるエネルギーが足りなかったためだと考えられる。水素分子で 3 次元計算を行っても電子は誘起されなかった。

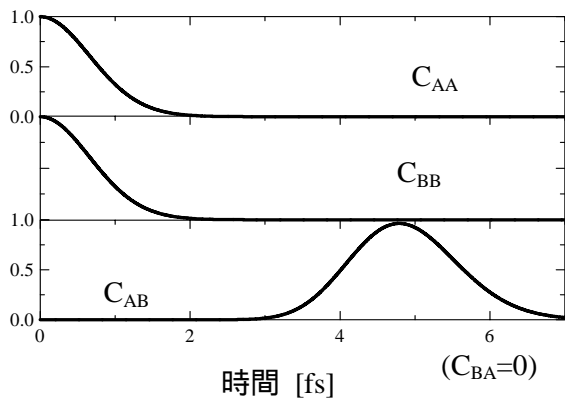


Fig.3 自己相関関数。 C_{BA} は重なりをもたないので 0 になっている。

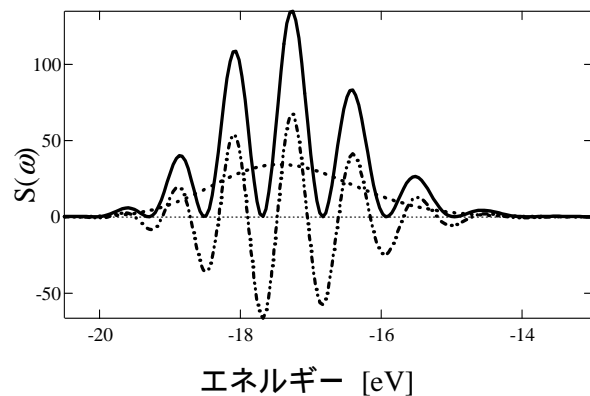


Fig.4 C_{AA} (dashed)、 C_{BB} (dashed)、 C_{AB} (dash-dotted)からもとめたエネルギースペクトルとその和(solid)