

多チャンネル波束法を用いた

レーザー場中の ($H^+ + H$) 衝突系における共鳴現象の解明

(新潟大学理学部) ○熊澤寿和、池原徹、島倉紀之

【はじめに】

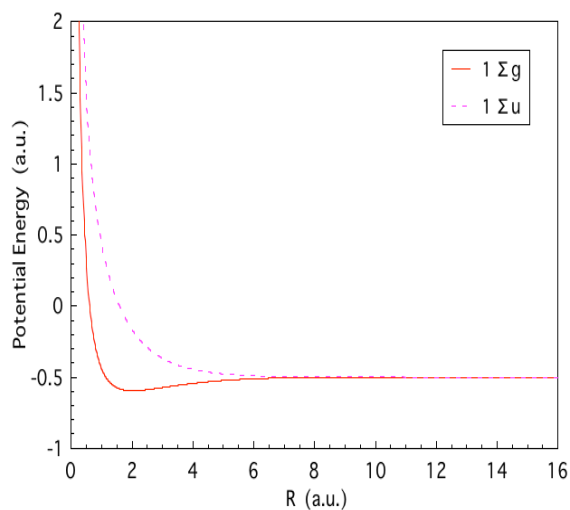
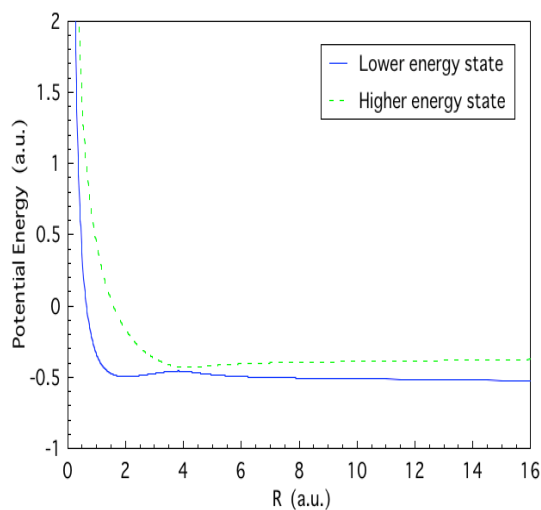
化学の分野において、反応の物理的イメージを把握することは非常に重要である。しかし数式や数値からはイメージを把握しにくい。多チャンネル核波束法 (Multi-channel wave-packet method) は反応の様子や共鳴などの現象を視覚的に捉える事ができ、物理的イメージが把握しやすく有効である。更に、レーザー場中の反応を扱うとき、DQMS 法 (Dressed Quasi-Molecular States method) を用いると、レーザー強度、振動数、光子数に応じたレーザー場中のポテンシャルを求めることができ、物理的イメージが把握しやすくなる。今回は主にこの二つの方法を ($H^+ + H$) 衝突系に応用し、この系における反応の様子や共鳴現象のダイナミクスに焦点を当ててみる。

【多チャンネル波束法】

この方法を用いると、反応に関与する状態が多チャンネルのときの、時間に依存するシュレディンガー方程式を数値的に解くことができる。つまり、系のハミルトニアンと、初期波動関数 $\psi(t=0)$ を与えることで、任意の時間 t における波動関数 $\psi(t)$ を求めることができる。またこの結果を用いて、その系の固有値、固有関数を求めることもできる (Spectral 法)。

【DQMS 法】

スレーター型の基底関数を用いて変分法により、 H_2^+ のポテンシャルエネルギー曲線を求めた (図 1)。このポテンシャルを用いて、DQMS 法により、レーザー場中の H_2^+ のポテンシャルエネルギー曲線 (DQMS ポテンシャルエネルギー) を求めた (図 2)。レーザーによる電場強度は $E=0.01$ a.u.、振動数は $\omega=0.1$ a.u. である。

図 1 H_2^+ のポテンシャルエネルギー曲線図 2 H_2^+ の DQMS ポテンシャルエネルギー曲線

【反応の様子および共鳴現象】

図2のポテンシャルエネルギー曲線において核間距離 $R=1\sim 4\text{a.u.}$ で Lower energy state にポテンシャルのくぼみができている。ポスター発表では、波束（運動エネルギー $E=0.053\text{a.u.}$ 、座標の半値幅 $\Delta R=1.5\text{a.u.}$ 、初期波束の位置 $R=10.0\text{a.u.}$ ）を Lower energy state に置いて小さい核間距離に向かって走らせた結果（図3）と Spectral 法で得られたレーザー場中の H_2^+ 分子イオンにおける Lower energy state のポテンシャル井戸中にある状態の固有値の結果（図4）を用いて、この系での共鳴現象について論じる。またレーザーの電場強度を変えた場合の、反応の様子および共鳴現象についても論じる。

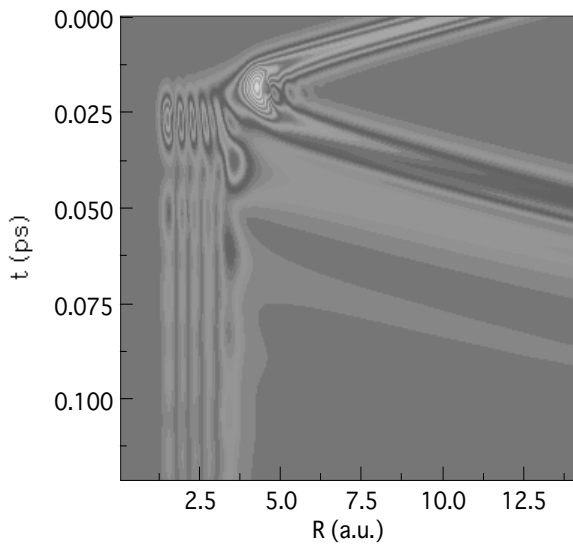


図3 レーザー場中の $(\text{H}^+ + \text{H})$ 衝突系における波束の動き（Lower energy state に波束を置いた場合）

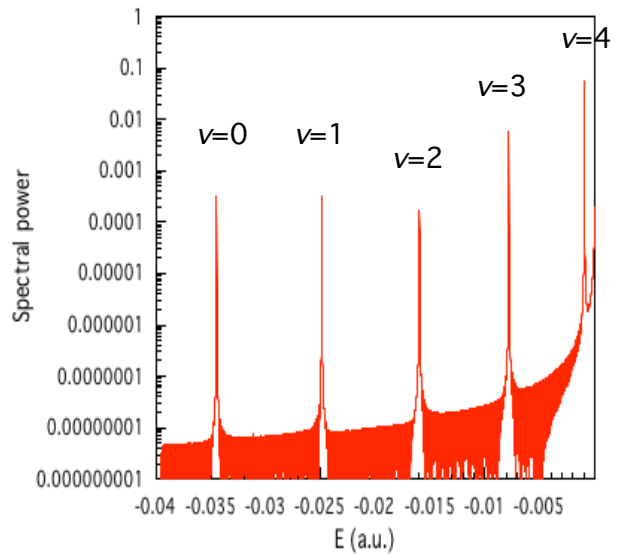


図4 レーザー場中の H_2^+ 分子イオンにおける Lower energy state のポテンシャル井戸中にある状態の固有値（横軸はポテンシャル障壁の頂点を0にとっている）

【共鳴現象】

古典的には入射エネルギーがポテンシャル障壁の高さより低い場合は、入射粒子はポテンシャル障壁ですべて跳ね返る。しかしそのような場合でも、量的には、ポテンシャルにくぼみがあると、そこに準安定な状態があり得るので、その状態のエネルギーと入射エネルギーが一致すると、波束はポテンシャル障壁ですべて跳ね返らず、ポテンシャルのくぼみに潜り込む場合がある。これはトンネル効果と呼ばれている。

図3はレーザー場中の $(\text{H}^+ + \text{H})$ 衝突系の波束の時間変化である。核間距離 $R=1.0\text{a.u.} \sim 4.0\text{a.u.}$ 、振動状態 $v=4$ に波束が主に捕獲されていることがわかった。

図4はレーザー場中の H_2^+ 分子イオンにおける Lower energy state のポテンシャル井戸中にある状態の固有値である。この結果より、この系ではポテンシャル井戸に $v=0\sim 4$ の5つの振動状態があることがわかる。この振動状態のエネルギーと波束の運動エネルギーが一致すればより多くの波束が振動準位に捕えられることが予想される。またレーザーの電場強度を変えた場合、波束が主に捕獲される振動状態が変化することがわかった。