

複素座標法による光イオン化断面積の変分計算

(慶大理工) 森田 将人, 藪下 聡

【序】

光イオン化に伴う連続状態の波動関数は、漸近領域で外向き球面波或いは Coulomb 波で示されることは分かっているものの、原子核付近での波動関数の振舞いの複雑さと、diffuse な特性からその表現には多くの基底関数を必要とする。また、連続状態を扱う種々の方法論における基底関数の選択、構築は研究者の経験に基づいてなされる場合も多く、その妥当性、収束性が必ずしも十分に検討されてはいない。本研究では、光イオン化断面積の絶対値の計算を通して、効率的かつ非経験的に連続状態を取り扱う計算手法を開発する。

【理論】

本研究では、基礎理論として複素座標法を用いている。これにより連続状態を扱う際にも、自乗可積分関数のみによる基底関数展開法が適用可能となる。また、一般分子向けに開発された複素基底関数法¹を採用することで、基底関数の最適化と複素スケール角の最適化を基底関数の複素軌道指数の最適化に一元化させることができる。本研究では、この複素軌道指数の最適化を行うことで基底関数を自動的に生成させる。また、複素座標法に基づく従来の研究では、even tempered で作られた多くの基底関数を必要としてきたため、計算量の観点からは、他の手法に対する顕著な優位性を示すことができなかつた。しかし、本手法を水素様原子に適用した結果、連続状態に対してわずか 1、2 個の基底関数を用いて最適化すれば、様々な準位からの光イオン化断面積を精度良く求められることが分かった。また、基底関数に STO、GTO のどちらを用いても精度の差は殆ど無く、束縛状態のエネルギーに対する結果とは異なる性質を示した。

本研究では、より一般的な系に対する複素軌道指数最適化の有用性を調べるため、簡単な多電子系への応用を行った。

【方法】

振動数依存分極率の変分的安定性に基づき、下記の有限和で離散近似された振動数依存分極率のスペクトル表現に対して、複素軌道指数に関する微分が 0 となる軌道指数値を数値 Newton 法により求めた。

$$\alpha_{\theta}^{-}(\omega) \approx \sum_n \frac{(\Psi_i(r) | \mu(r) | \psi_n(re^{-i\theta}))(\psi_n(re^{-i\theta}) | \mu(r) | \Psi_i(r))}{E_i + \omega - E_n} \quad (1)$$

(上式の丸括弧は動径成分に対して複素共役を取らないことを示す。)

また、その複素軌道指数における振動数依存分極率の虚部から光イオン化断面積を求めた。遷移モーメントは Velocity Form を用いて評価した。

以下に示した結果は、He 原子の直接イオン化過程 (1s)² (1skp) の断面積の計算結果である。基底関数は [10s2p] を用い、連続状態用の 2 個の p 型の基底関数は、逐次最適化により軌道指数を決定した。計算レベルは TDA 及び RPA を用いた。

【結果及び考察】

図1、図2にHeに対するTDA及びRPAの結果を示した。また、比較のため、従来の方法であるeven temperedで作られた基底関数を用いた場合の結果([10s13p]、複素スケール角20度)を併記した²。複素軌道指数の最適化により、連続状態用の基底関数を2個用いた結果は、従来の方法で13個の基底関数を用いた場合に匹敵する精度を与えている。多電子系においても本手法が精度を保ちつつ基底関数を減らすことに成功している。

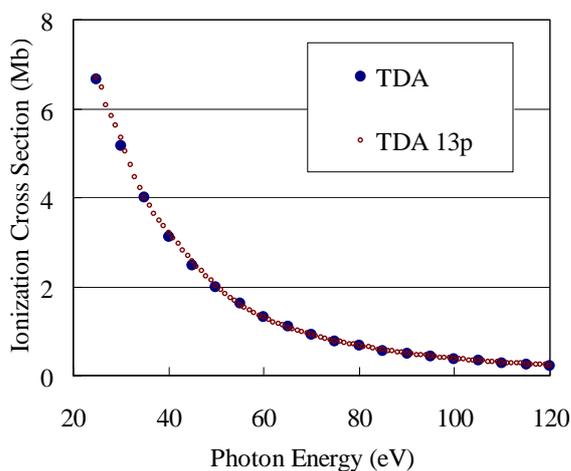


図1. Heの光イオン化断面積 (TDA)

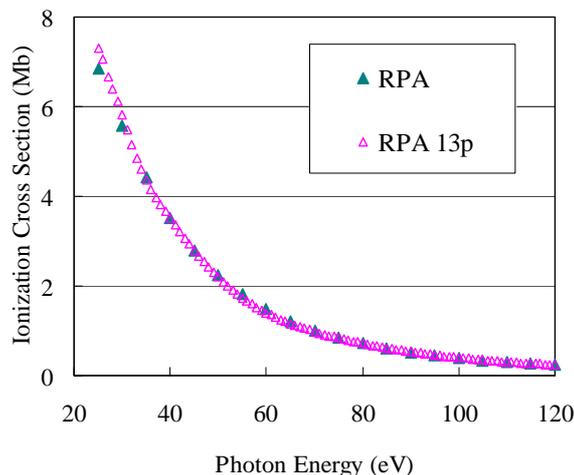


図2. Heの光イオン化断面積 (RPA)

また、図3にSamsonらの実験値との比較を示した。(今回、計算に際して2電子励起の自由度を取り入れていないため、光子エネルギー60eV付近に存在する2電子励起に伴うイオン化のピークは除いている。)本手法が実験値と比較しても広いイオン化エネルギー領域でよく一致していることがわかる。当日は、SDCIによるより精度の高い計算結果も示し、実験値とのずれの原因や共鳴ピークの計算に対する考察も行う。

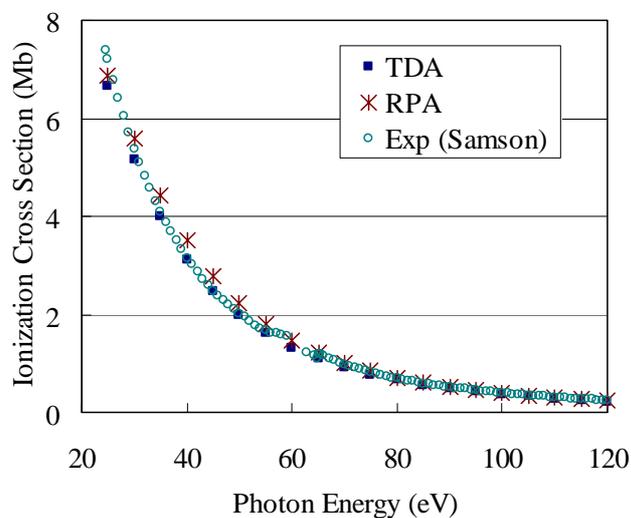


図3. Heの光イオン化断面積 (実験値との比較)

【参考文献】

1. T. N. Rescigno, C. W. McCurdy, Phys. Rev. A, 31, (1985) 624
2. S. Yabushita, C. W. McCurdy, and T. N. Rescigno, Phys. Rev. A, 36(1987) 3146
3. J. A. R. Samson, Z. X. He, L. Yin, and G. N. Haddad, J. Phys. B, 27(1994) 887

【謝辞】

本研究は、文部科学省特定領域研究「強レーザー光子場における分子制御」及び21世紀COEプログラム「慶應義塾大学・機能創造ライフコンジュゲートケミストリー(LCC)」の助成によって実施された。謝意を表す。