

レーザーを用いた衝突制御と分子生成過程の理論的研究

(新潟大院・自然研¹、新潟大・理²) ○池原 徹¹、熊澤 寿和¹、島倉 紀之²

【序論】

化学反応において、レーザーを照射することで照射しない場合とは異なる生成物が得られることがある。このようなレーザー場中での反応を、我々は DQMS 法と MCWP 法という二つの方法を組み合わせて扱っている。DQMS 法により「光ドレスト状態」を作ることができ、レーザー強度、振動数、光子数に応じたレーザー場中でのポテンシャルエネルギーを求めることができる。また MCWP 法を用いると、数式や数値からは分かりにくい反応の様子を視覚的に捉えることができ、反応の物理的イメージが掴みやすくなる。本研究ではレーザー場中での ($H^+ + H$) 衝突系に着目し、水素分子イオン生成をレーザーで制御する可能性を探っていく。

【計算方法】

1. DQMS (Dressed Quasi-Molecular State) 法

まず H_2^+ のポテンシャルエネルギーを求め (図 1)、これを用いて電場強度 $I=0.02$ a.u.、振動数 $\omega=0.1$ a.u. の場合の H_2^+ の DQMS ポテンシャルエネルギーを求めた (図 2)。図 2 において核間距離 $R=1\sim 3.5$ a.u. で Lower Energy State にポテンシャル井戸ができていくのがわかる。

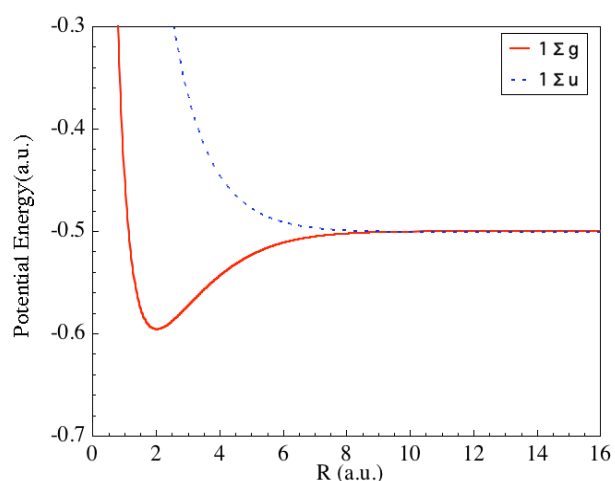


図 1 H_2^+ のポテンシャルエネルギー曲線

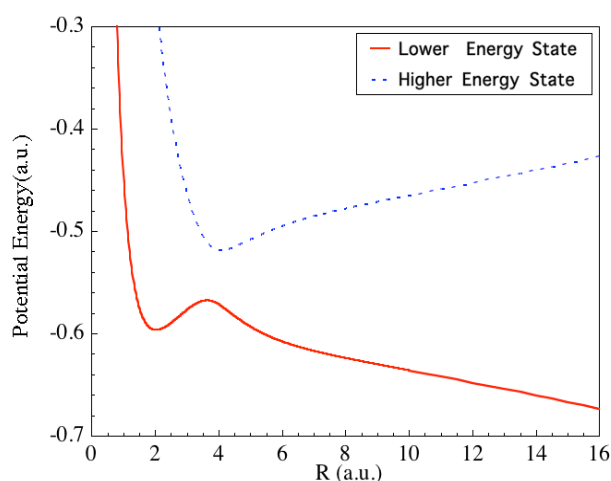


図 2 H_2^+ の DQMS ポテンシャルエネルギー曲線

2. MCWP (Multi-Channel Wave-Packet) 法

この方法は波束を用いて時間依存のシュレーディンガー方程式を解く方法であり、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。

【計算結果】

1. 波束の時間発展の様子

ガウス型波束（衝突エネルギー $E=0.06822\text{a.u.}$ 、波束の幅 $\Delta R=3.0\text{a.u.}$ ）を Lower Energy State の核間距離 $R_0=10\text{a.u.}$ に置いて、小さい核間距離に向かって走らせた。その結果を図3に示す。

波束の衝突エネルギーが井戸中の振動状態のエネルギー固有値と一致すると、波束の一部はポテンシャル井戸の中に潜り込む。この潜り込んだ波束をレーザー制御によって、より多く井戸中に残すことを試みる。

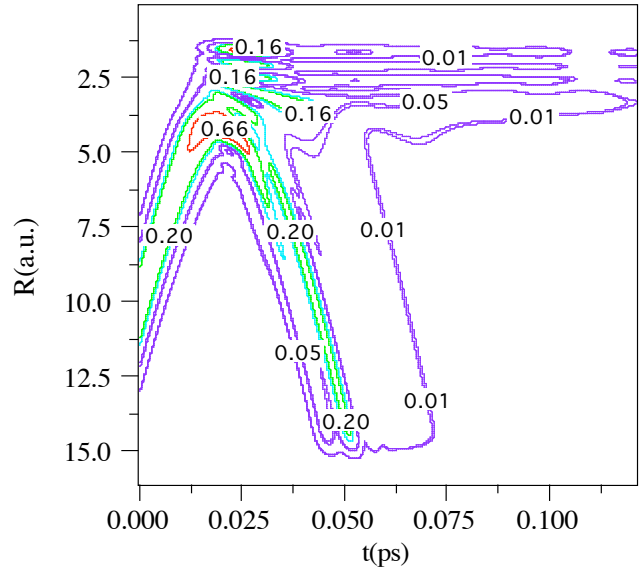


図3 Lower Energy State の波束の時間発展

2. レーザー制御による分子生成量の変化

衝突の途中で電場強度を変えることにより、井戸中に捕獲される波束の量がどれだけ変化するか計算を行った。図4は始めにかけた電場強度 $I=0.02\text{a.u.}$ から衝突の途中でそれぞれ① $I=0.015\text{a.u.}$ 、② $I=0.01\text{a.u.}$ 、③ $I=0.005\text{a.u.}$ に変えた時の Lower Energy State にある波束の確率の時間変化を示している。比較のため電場強度を変えない場合も併せてのせておく。なお、電場強度を変える時間はどの場合も $t=0.024\text{ps}$ とした。

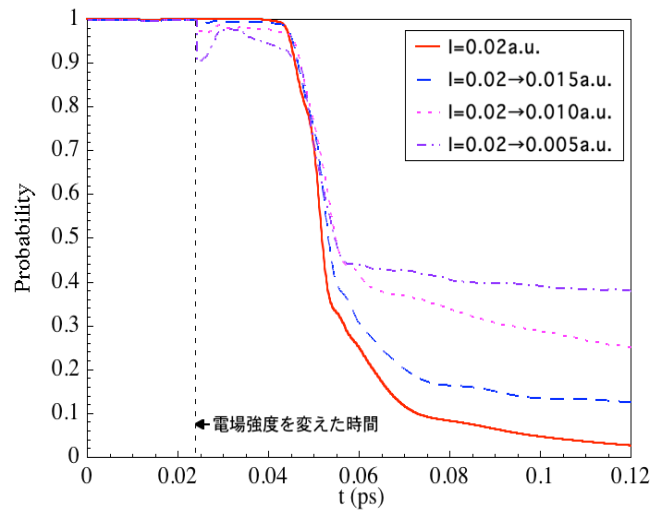


図4 衝突の途中で電場強度を変えた時、Lower Energy State に残る波束の確率の時間変化

この図からわかるように、衝突の途中で電場強度を小さくすると井戸中に捕獲される波束の量が多くなる。これは分子生成量をレーザーで制御できる可能性を示している。ポスター発表では、図4の結果をそれぞれの電場強度のポテンシャルエネルギー曲線と関連づけて論じていく。また、波束の時間発展の様子を示すことにより、生成した H_2^+ の振動-回転状態についても論じていく。