

○一谷 和弘, 高田 裕輔, 伊藤 智哉, 杉森 公一, 長尾 秀実, 西川 清 (金沢大院自然)

【序】

近年, レーザー技術の進展により, フェムト秒オーダーの超短パルス高強度レーザーの開発や, 光パルス成形技法の発展により, 分子系の特定の状態に高効率で遷移させるなどの状態制御が可能になった. これまでは π パルス法, 誘導ラマン断熱通過法, 光誘起ポテンシャル断熱通過法等の方法で, ある目的とする状態から特定の量子状態を生成するという大変興味深い結果を得ることが出来た. 本研究では古典・量子力学の両分野で最も重要な系の一つである, 調和振動子における波束のダイナミクスそのものに着目する. レーザーを調和振動子の波束に照射する事により, レーザー場によって調和振動子の状態が変化する. 波束をある特定の場所に滞在させたり, 座標が正の部分のみで運動させる等, 波束の運動を自由自在に制御することを目的としてシミュレーションを行う.

【計算方法】

一次元系の調和振動子のポテンシャルは,

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

で表される.

外場の入った調和振動子系のハミルトニアンは,

$$H = T + V(x) + W(x, t).$$

ここで T , $V(x)$, $W(x, t)$ はそれぞれ運動エネルギー, ポテンシャル, 外場と分子系の相互作用である. 外場と分子系の相互作用である $W(x, t)$ は,

$$W(x, t) = -\mu(x)E(t)$$

$\mu(x)$ は双極子モーメント関数で, x で近似し, $E(t)$ は外場である.

時間依存シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

の解は, 時間発展演算子 $U(\Delta t)$ を用いて,

$$|\psi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t) |\psi(0)\rangle.$$

ここで $|\psi(\Delta t)\rangle$ と $|\psi(0)\rangle$ は微小時間後の波束と初期波束である.

時間発展演算子を,

$$U(\Delta t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}\Delta t} \cong e^{-i\frac{V+W}{2\hbar}\Delta t} e^{-i\frac{T}{\hbar}\Delta t} e^{-i\frac{V+W}{2\hbar}\Delta t} + O((\Delta t)^3)$$

で近似した. この近似方法は, SOM(Split Operator Method)と呼ばれ, ノルムを保存する微小時間発展であるため, 時間依存ハミルトニアン等の複雑なハミルトニアンを精度よく取り扱うことができる.

図 1 は波束に定常波レーザーを照射したときの, 波束の運動の一例である.

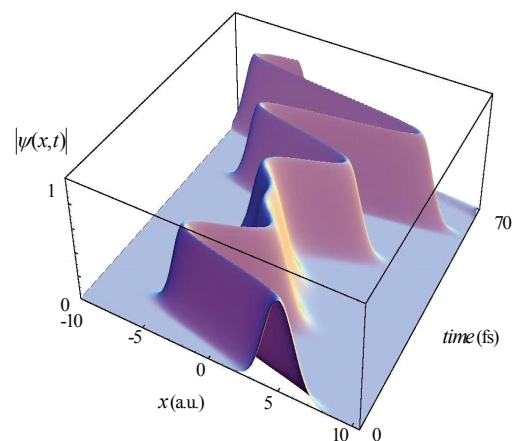


図 1. 波束の運動

【結果】

初期波束として、次式で表されるコヒーレント状態を考える。

$$\psi(x,t) = \sqrt[4]{2/\pi\sigma^2} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2} + ip_0x\right].$$

この初期波束に様々な条件でレーザーを照射した波束の運動を解析した。

(1) $E(t) = \sin(\omega t)$ $\omega = \sqrt{k/m}$ (共鳴)のとき

初期波束としてコヒーレント状態を用いたので、外場との相互作用があっても波束の形状は変わらずに図1のように運動をする。

(a) $x_0 = 0, p_0 = 0$ のとき

外場の振動数 ω は波束と共鳴しており、光の放出が起こらず、調和振動と共鳴が起き図2のような位相空間で波束は強制振動しながらエネルギーが増え続けていった。

(b) $x_0 = 4.71, p_0 = 7.01 \times 10^{-3}$ のとき

初期位置、運動量を変えることにより波束は図2のように振動しながら基底状態になるまで光の放出が起き、後に光を吸収し続け波束は強制振動しながらエネルギーが増え続けた。

(2) $E(t) = |\sin(\omega t)|$ $\omega = \sqrt{k/m}$ (共鳴), $x_0 = 0, p_0 = 0$

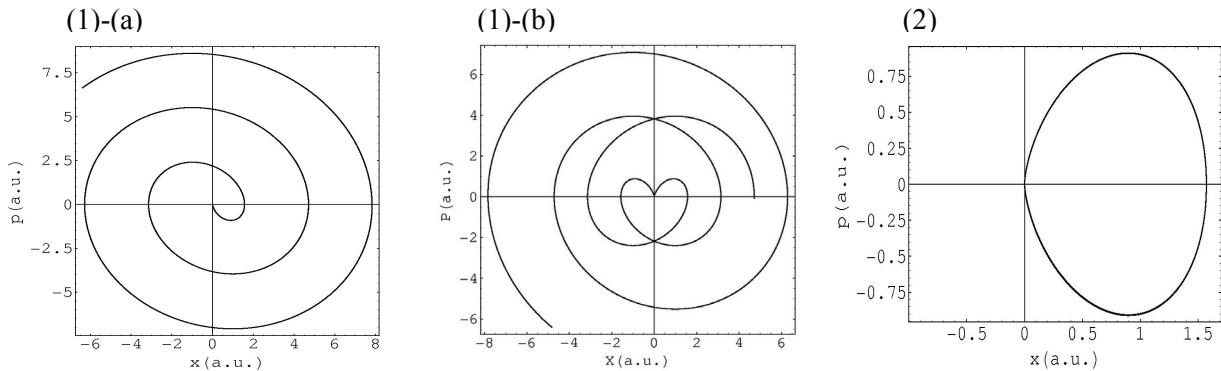


図2. 位相空間中での軌跡

(3) 図3の外場を照射したときは、図4の様に x が正の部分で振動する軌跡を示した。

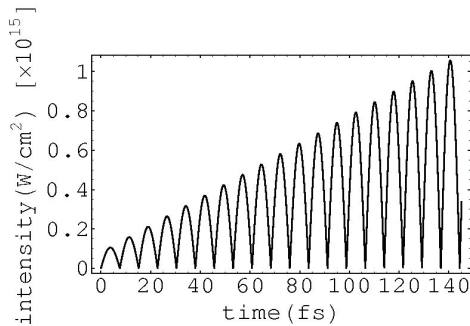


図3. 外場の波形

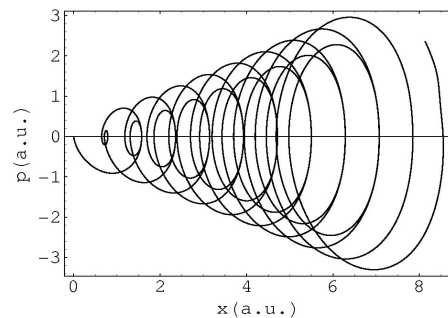


図4. 位相空間中での軌跡

尚、より詳細なシミュレーション結果は当日報告する。

References

- [1] M. D. Feit, J. A. Fleck, Jr., and A. Steiger, J. Comput. Phys. **47**, 412 (1982)
- [2] P. Carruthers and M. M. Nieto, Am. J. Phys. **7**, 537 (1965)