

Enhanced Ionization のボーム経路解析

Analysis of Enhanced Ionization by Bohmian Trajectories

○澤田 亮人, 佐藤 健, 石川 顕一

○Ryohto Sawada, Takeshi Sato, Kenichi L. Ishikawa

東大院工

E-mail: sawada49@atto.t.u-tokyo.ac.jp

【イントロダクション】

高強度レーザーパルスを原子や分子に照射するとイオン化が生じる。こうした現象はアト秒、オングストローム精度の測定への応用が期待されている。本研究では、高強度場現象の一つである Enhanced Ionization (高強度レーザーを分子に照射した際、原子核間距離がある一定の距離で急激なピークを持つ現象) のボーム経路解析によるシミュレーションを行った。

【研究手法】

ボーム経路解析は波動関数から得られる電子密度の流速を用いた解析である。そのため、蛍光ビーズによる流体解析と同じ要領で電子の軌跡を求め、電子の挙動を明快に把握できる。また、ボーム経路は波動関数から求められるため、ボーム経路の集合は波動関数と等価な情報を持つ。本研究では時間依存シュレディンガー方程式の厳密計算から得られた波動関数を用いてボーム経路を求めることで、Enhanced Ionization のメカニズムを明らかにした。

【研究結果】

図は 1 次元 H_2^+ モデル分子イオンにおける Enhanced Ionization のボーム経路解析の結果である。上グラフは、原子核間距離 R に対するイオン化率のプロットである。 $R = 6.6$ 原子単位付近でイオン化率がピークを持っているのが解る。下図は $R = 6.6$ 原子単位におけるボーム経路である。従来、Enhanced Ionization では電子は一方の核に局在化した後に直接イオン化すると考えられてきたが、本研究は、電子がイオン化直前に核間を振動すること (赤線、黒線、黄線) を明らかにした。これは従来の解析では見落とされていたものである。講演では 1 電子系に加え、2 電子系の解析結果も報告する。

図: 上グラフは原子間距離に対するイオン化率のプロット。下グラフは横軸をサイクル数、縦軸をボーム粒子の位置としたボーム経路のプロット。

