論文の内容の要旨

論文題目 Unified understanding of tunneling ionization and stabilization of atoms in intense laser fields

(強光子場中における原子のトンネルイオン化およびイオン化抑制現象に関する統一的理解)

氏名 宮城 晴英

1. 序

強光子場中における原子は、非摂動論的なイオン化現象を示す。光子場強度が非常に大きい場合、低振動数領 域ではトンネルイオン化が、高振動数領域ではイオン化抑制現象が起こる。トンネルイオン化のメカニズムは 静電場による原子のイオン化と関連づけて理解されており、その考え方に基づいて Ammosov-Delone-Krainov (ADK)理論 [1] や Keldysh-Faisal-Reiss (KFR)理論 [2] が考案された。一方、イオン化抑制現象は高振動数 Floquet 理論 [3] で再現されるものの、そのメカニズムはトンネルイオン化ほど明快には理解されていない。更 に、これら低-高振動数領域における 2 種類のイオン化メカニズムを統一的に説明する理論はなく、振動数の 変化と共にどのように一方から他方へ推移するのか明らかではない。

本研究では、強光子場中における原子のイオン化を Floquet 理論に基いて調べた。原子に定常レーザー場を 印加した系は、Floquet 理論を用いることで時間に依存しない多チャンネル問題に置き換えられる。この系の 複素擬エネルギーリーマン面は(近似的に光子数が N 個増減したチャンネルまでを考慮すると)2^{2N+1} 枚の リーマン面を張り合わせた構造をもつ。光子場強度が零のとき、原子の束縛状態に対応する散乱行列の極は、 このリーマン面の実軸上に位置する。更に、別のリーマン面の同じ位置に実験的に観測できない極(影極)が 存在する。光子場の振動数を固定し光子場強度を上げていくと、これらの極はそれぞれ独立にリーマン面上を 動き回り、リーマン面の限られた領域(共鳴区域)にあるときだけ、実験的にイオン化共鳴状態として観測さ れうる。従って、共鳴極が共鳴区域から外れて影極になったり、影極が共鳴区域に侵入して共鳴極となる場合 がある。本研究では、これらの極の軌跡に基づいて、原子のレーザーイオン化のメカニズムを低-高振動数領 域にわたって統一的に理解することを試みた。

第2章において、2次元ガウシアンポテンシャルに1電子が束縛されたモデル原子に対して円偏光光子場を 印加した系を考察した。複素擬エネルギーリーマン面上の共鳴極と影極の軌跡を詳細に計算し、この軌跡を電 子の動径運動に対するポテンシャル曲線を用いて解析した。そして、モデル系で得られたイオン化メカニズム に対する理解を実在系で検証すべく、第3章では最も基本的な系である、円偏光および直線偏光光子場を印加 した水素原子について考察を行った。

2.2次元ガウシアンポテンシャルモデル

直線偏光および円偏光レーザー場を照射したときの原子のイオン化過程を研究するには、直線偏光に対する計算では 1 次元原子を、円偏光に対する計算では 2 次元原子を用いるのが、物理的本質をついたモデル化であると考えられる。そこで、本研究では、束縛状態を 1 つだけ有する 1 次元ガウシアンポテンシャル $V_{1D}(x) = -\exp(-x^2)$ に直線偏光レーザー場を印加した 1 電子系、および 2 次元ガウシアンポテンシャル $V(r) = -V_0 \exp\left[-(r/r_0)^2\right]$ に円偏光レーザー場を印加した 1 電子系を、イオン化を考察する為の単純なモデルとして採用した。ここで、2 次元ガウシアンポテンシャルのパラメータを $V_0 = r_0 = 1.404$ a.u. とおくことにより、両モデル原子は共に E = -0.477 a.u. に唯一の束縛状態を有するようになる。これらの系に対して、Floquet 理論を適用し、加速度ゲージにおける時間依存 Schrödinger 方程式から (動径) 波動関数に対する連立 微分方程式を導出した。Siegert 境界条件下でこれを数値的に解き、複素擬エネルギーリーマン面上における 散乱行列の共鳴極および影極の位置を計算した。2 次元系の動径波動関数に対する連立微分方程式は、原子単位を用いると

$$\left[-\frac{1}{2r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right) + \frac{(n+\mu)^2}{2r^2} + n\omega\right]g_n^{\mu}(r) + \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_{n-m}(r;\alpha_0)g_m^{\mu}(r) = Eg_n^{\mu}(r),\tag{1}$$

と書ける。但し、相互作用ポテンシャル関数は次式である。

$$V_n(r;\alpha_0) = -V_0 \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2} - \frac{\alpha_0^2}{2r_0^2}\right) i^n I_n\left(\sqrt{2\alpha_0 r}/r_0^2\right)$$
(2)

 $I_n(\cdot)$ は変形 Bessel 関数である。 ω はレーザー場の角振動数、 α_0 はポンデロモーティブ半径、そして $\mu \equiv M - n$ (M は角運動量量子数、n は光子数) は系のもつ対称性に起因して生じた量子数であり、この μ ごとに連立微 分方程式を解けばよい。なお、連立微分方程式を解くための初期値として、速度ゲージにおける複素スケーリ ング法、即ち複素回転変換した Floquet Hamiltonian の対角化によって得られた共鳴極の位置を使用した。1 次元ガウシアンポテンシャルモデルに対する計算も同様の方法で実行した。

2次元系において、 ω を固定し α_0 を変化させたときの、複素擬エネルギーリーマン面における散乱行列の 極の軌跡を図1に示す。低振動数領域($\omega = 0.3$)では、各閾値付近で共鳴極(実線)と影極(破線)が次々にバ トンタッチをしている。このため、 α_0 の増加に伴い、束縛状態に由来する電子状態が断熱的に低エネルギー 方向にポンデロモーティブエネルギーシフトしながら、イオン化崩壊幅が単調増加している、と看做すことが できる。これはトンネルイオン化の挙動を示している。他方、1光子イオン化が可能な高振動数領域($\omega = 0.6$) では、ポンデロモーティブエネルギーシフトは起こらず、イオン化抑制現象が起こっている。また、1次元系 に対する計算結果でも、極の軌跡はこれと類似したものとなった。

観測されたトンネルイオン化とイオン化抑制現象のメカニズムを説明するために、連立微分方程式 (1) の中 に現れる有効ポテンシャル行列

$$\left(\boldsymbol{V}_{\text{eff}}^{\mu}(r;\alpha_{0})\right)_{nm} = \left(\frac{(n+\mu)^{2}}{2r^{2}} + n\omega\right)\delta_{nm} + V_{n-m}(r;\alpha_{0})$$
(3)

を用いて考察を行った。有効ポテンシャル行列の対角要素は各 Floquet チャンネルに対する透熱ポテンシャル を意味し、高振動数近似におけるドレスト・ポテンシャル、即ち、Kramers-Henneberger(KH) ポテンシャル は $(V_{\text{eff}}^{\mu}(r;\alpha_0))_{00}$ である。また有効ポテンシャル行列を対角化したときの固有値は断熱ポテンシャルを意味 する。 ω 固定のもと α_0 を増加させたときのポテンシャル曲線の変化の様子を図 2 に示す。低振動数領域では、 ポテンシャル曲線間の反発の影響で最低の断熱ポテンシャル曲線の $r = \alpha_0/\sqrt{2}$ の位置に井戸が形成される。こ の井戸は α_0 の増加とともに遠方へ移動しながら、遠心力ポテンシャル曲線群のなす傾斜を低エネルギー方向 に移動する。束縛状態は α_0 の増加に伴いこの井戸に形成される共鳴状態となり、井戸とともに低エネルギー 方向へポンデロモーティブエネルギーシフトすることが理解される。即ち、低振動数領域におけるトンネルイ オン化は、最低断熱ポテンシャルに対する形状共鳴散乱と理解できる。他方、高振動数領域では KH ポテン シャルがイオン化を支配する。 α_0 が中間的な値のときは KH ポテンシャルは擬交差により破壊されるが、 α_0 が十分大きくなると擬交差が小さくなり KH 近似が次第に良くなっていく推移が観察できる。原子の束縛状態 は α_0 の増加により一度は短寿命のイオン化共鳴状態となるものの、次第に KH ポテンシャルが有する束縛状 態 (KH 束縛状態) に推移し、イオン化抑制がおこる。更に、n = 0, -1 のみを考慮した 2 チャンネルモデルの 計算でも、イオン化抑制現象を再現することが確かめられた。このことから高振動数領域におけるイオン化抑 制は、主に 2 つのチャンネルが関与する Feshbach 共鳴散乱として理解できる。

以上のようにして、ポテンシャル曲線の擬交差からトンネルイオン化とイオン化抑制現象を統一的に理解で きることがわかった。遠心力が存在しない1次元モデル系では、各 Floquet チャンネルのポテンシャル曲線は 交差しないため、このように明快にイオン化メカニズムを理解することはできない。



図 1:2 次元ガウシアンポテンシャルモデルに対して、 ω を固定し α_0 を変化させたときの、複素擬エネルギーリーマン面における散乱行列の極の軌跡。縦線はチャンネル閾値を意味し、実線と点線はそれぞれ共鳴極および影極の軌跡を表す。(a) は低振動数領域 ($\omega = 0.3$)、(b) は高振動数領域 ($\omega = 0.6$) における結果である。プロット点に付した数字は、その点における α_0 の値である。



図 2:2 次元ガウシアンポテンシャルモデルにおける、電子の動径運動に対するポテンシャル曲線。(a) は低振動数領域 ($\omega = 0.3$)、(b) は高振動数領域 ($\omega = 0.6$) における結果である。黒線は断熱ポテンシャル曲線、ピンク破線は透熱ポテンシャル曲線、紫破線は KH ポテンシャル曲線を意味する。また図中の各帯は、図 1 の同じ色の共鳴状態の複素擬エネルギー固有値を表す。

3. 水素原子

モデル系で得られたイオン化メカニズムの理解を実在系で検証するために、最も基本的な系である、円偏光 および直線偏光レーザー場中の水素原子について考察を行った。Floquet 理論のもと、Sturmian 基底を用いて 速度ゲージの Floquet Hamiltonian を行列表示し、これに複素スケーリング法を適用することによって共鳴極 の位置を計算した。その結果、低振動数領域 ($\omega = 0.2$) では、両偏光の場合ともに極の軌跡はトンネルイオン 化の挙動を示した。但し、円偏光の場合は、閾値において共鳴極と影極が入れ替わる、図 1(a) に示した 2 次 元ガウシアンポテンシャルモデルと類似の軌跡を示した。他方、直線偏光の場合にはそれが起こらず、共鳴極 同士が頻繁に衝突・反発を起こしながらポンデロモーティブエネルギーシフトする様子が示された。即ち、低 振動数領域では極の軌跡に偏光依存性が認められた。一方、高振動数領域 ($\omega = 0.6$) では極の軌跡に偏光依存 性はなく、両偏光の場合ともにほぼ同様なイオン化抑制現象が起こった。以上のような極の挙動は、Potvliege らの先行研究でも見いだされているが [4,5]、そのメカニズムは理解されていない。

低振動数領域における偏光依存のトンネルイオン化と、高振動数領域における偏光非依存のイオン化抑制 現象のメカニズムを解明すべく、動径波動関数に対する連立微分方程式に現れる有効ポテンシャル行列を用い て考察を行った。その結果、円偏光の場合、低–高振動数領域におけるイオン化は、2次元ガウシアンポテン シャルモデルの場合とほぼ同等なメカニズムであることがわかった。即ち、低振動数領域では、最低断熱ポテ ンシャルに井戸が現れ、この井戸に形成される共鳴状態としてトンネルイオン化が説明できる。高振動数領域 では、 α_0 の増加によって束縛状態は一度は短寿命のイオン化共鳴状態となるものの、次第に KH ポテンシャ ルが有する KH 束縛状態に推移し、イオン化抑制がおこる。他方、直線偏光の場合は、エネルギースペクト ルが 2 ω の周期性を有するため、ポテンシャル曲線は至る所で交差する。このため、そもそも最低断熱ポテン シャル曲線が存在せず、トンネルイオン化のメカニズムは 2次元ガウシアンポテンシャルモデルのそれとは大 きく異なる。しかし、チャンネル間の相互作用が最大となる $r \simeq \alpha_0$ 付近では断熱ポテンシャルが歪んで障壁 が形成される。この障壁の存在がトンネルイオン化メカニズムの根拠と考えられる。高振動数領域では、2次 元ガウシアンポテンシャルモデルの場合でも最低断熱ポテンシャル曲線がイオン化抑制に関与しなかったた め、直線偏光の場合でも、イオン化抑制現象のメカニズムは 2次元ガウシアンポテンシャルモデルと同様に説 明できる。このため、高振動数領域における極の軌跡は偏光非依存性を示すのである。

更に、高振動数領域におけるイオン化抑制現象を、加速度ゲージにおける2チャンネルモデルを用いて考察 した。特に、直線偏光レーザー場中における circular Rydberg 状態のイオン化抑制現象を、2チャンネルモデ ルにおけるポテンシャルの擬交差の観点から明快に説明した。そして、circular Rydberg 状態のイオン化抑制 現象が起こる臨界光子場強度を見積もる単純な公式を導いた。この公式は、Potvliege and Smith によって発 表された臨界光子場強度の経験式 [6] とほぼ一致することがわかった。

参考文献

[1] M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, Zh. Eksp. Teor. Fiz **91**, 2008 (1986) [Sov. Phys. JETP **64**, 1191 (1986)].

- [2] L. V. Keldysh, Zh. Eksp. Teor. Fiz 47, 1945 (1964) [Sov. Phys. JETP 20, 1307 (1965)].
- [3] M. Gavrila, J. Phys. B **35**, R147 (2002).
- [4] R. Shakeshaft and R. M. Potvliege, Phys. Rev. A 42, 1656 (1990).
- [5] M. Dörr, R. M. Potvliege, D. Proulx, and R. Shakeshaft, Phys. Rev. A 43, 3729 (1991).
- [6] R. M. Potvliege and P. H. G. Smith, Phys. Rev. A 48, R46 (1993).