

氏名(本籍)	金 ^{きん} 英 ^{えい} 俊 ^{しゅん} (中国)
学位の種類	博士(工学)
学位記番号	博甲第 6406 号
学位授与年月日	平成 25 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当
審査研究科	数理物質科学研究科
学位論文題目	強レーザー場における水素分子の非線形過程の理論研究
主査	筑波大学教授 理学博士 戸嶋 信 幸
副査	筑波大学教授 理学博士 矢花 一 浩
副査	筑波大学准教授 理学博士 企 暁 民
副査	筑波大学准教授 PhD 小 泉 裕 康
副査	筑波大学准教授 博士(理学) 鈴木 修 吾

論文の内容の要旨

近年レーザー技術の進歩により、原子分子内のクーロン相互作用と同等以上の強度を持つ短パルスレーザーが利用できるようになった。これに伴い理論研究の進展も日進月歩の急激な発展を遂げつつある。本研究では強レーザー場における水素分子の非線形過程をシュレーディンガー方程式の直接解法という厳密な手法を用いて理論研究を行ったものである。大きく分けて「クーロン爆発における解離運動エネルギーの分布」「電離率のレーザー偏極方向依存性」「三次高調波の偏極方向依存性異常」の3つのテーマについて研究を行っている。理論手法であるシュレーディンガー方程式の直接解法には、空間グリッドによる離散化に GPS 法を、時間発展には split-operator 法を利用し、すべての数値計算プログラムを一から構築している。

水素分子が2重電離すると二つの陽子はクーロン斥力によって解離しクーロン爆発を起こす。最近の実験によって解離した陽子の運動エネルギー (KER) に今まで見つかったピークと異なる、波長に依存する新たなピークが発見された。波長に強く依存することから特定のレベル間の共鳴が原因であることが示唆されるが、本研究によって $1s\sigma_g$ から $2p\sigma_u$ への三光子共鳴であることを突き止めた。直接解法で作られる分子状態から $2p\sigma_u$ 状態をのぞくことによって共鳴のピークが消えることを示し、この準位間の遷移が原因であることの確証を与えている。

分子の電子分布は等方的でないから、二原子分子にレーザーを当てて電離する場合、レーザー場の偏極方向と分子方向の間の角度に依存性が期待される。実験によってこの角度依存性が測定されたが、既存の理論計算では全く説明がついていなかった。本研究では直接解法による厳密な波動関数を用いることにより、実験結果と見事な一致を見出した。またこの際、トンネル効果によって電離を説明する MO-ADK 理論は電荷分布の異方性を正しく取り込んでいないため角度依存性を説明できないことを示した。

水素分子を含む二原子分子の高次高調波 (HHG) 生成機構の実験研究は幅広く行われているが、理論研究は一中心展開を用いた近似計算がほとんどで満足いく研究はまだされていなかった。本研究では上記の直接解法によって波動関数を求め、時間の関数として誘起双極子をまず計算している。この誘起双極子をフーリエ変換すれば HHG のスペクトルが直接求められる。本研究ではこの厳密な手法を用いて、HHG スペ

クトルのレーザー偏光軸と分子軸の角度依存性を調べた。その結果、三次高調波の成分が異常な角度依存性を示すことを見出した。この角度が30度あたりで三次高調波の成分は5ケタも減少する。この極小を示す角度は二原子分子の核間距離に依存し、核間距離が長くなるほど大角方向へ移動する。また、核間距離が1.9a.u.以下では極小点が消失する。この原因を調べるため誘起双極子の軸方向運動量成分を分解し、 σ 状態間の遷移と π 状態間の遷移が干渉しあうことによって発生することを突き止めた。この現象はまだ実験によって確認されていないが、極小点が核間距離に強く依存することを利用すれば、三次高調波の角度依存性を測定することにより分子の核間距離などの内部状態を精密に測定することが可能となる。

審査の結果の要旨

水素分子の非線形現象に対して直接解法を駆使して網羅的に研究した力作である。これまでの理論研究では密度汎関数を用いたものがあるが、実験値との一致は悪かった。本研究では可能な範囲内で近似を排斥し、精密な数値計算を行うことにより理論のあいまいさを除去した大変信頼度の高いものである。数値計算のプログラムは既成のパッケージを一切使わず一から構築しており、独自性が高い。数値積分等の収束性も精密に吟味しており十分信頼できるものである。3つの異なる現象の解析を行っているが解離のKERスペクトル、電子解離の偏極軸依存性はともに実験値との一致が良好で実験結果の解析に大きな寄与をしている。三次高調波の異常性は新発見でこれからの理論実験の研究に大きな影響を与えるであろう。これらの研究結果はPhysical Review誌に3編の論文としてすでに発表されており、水準の高い研究であることを裏付けている。三種の過程に最新かつ高精度の手法を用いて統一的に解析したものであり高く評価できる。

平成25年2月14日、数理物質科学研究科学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。