

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2005～2008

課題番号：17540374

研究課題名 (和文) 量子遷移過程におけるコヒーレントな長時間相関の検証とその制御のモデル化の理論

研究課題名 (英文) Theoretical study of coherent long-time correlations in quantum mechanical transition processes

研究代表者

小池 文博 (KOIKE FUMIHIRO)

北里大学・医学部・准教授

研究者番号：90095505

研究成果の概要：

中間状態の寿命を超える時間相関を論じるためには、寿命や複数のエネルギー準位間のエネルギー差などの精密計算が欠かせないが、コンピューターとソフトウェアの整備によってその環境を整えることができた。

研究の成果は、以降に掲げるようにいくつかの論文に纏められ、量子遷移過程を理解する上で精密な非経験的計算がきわめて重要な役割を果たすこと、そして、時間依存性を取り入れた (Time Dependent な) 取り扱い法の開発が重要であることの認識に向けての端緒を示すことができた。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2005年度	1,100,000	0	1,100,000
2006年度	700,000	0	700,000
2007年度	500,000	150,000	650,000
2008年度	500,000	150,000	650,000
総計	2,800,000	300,000	3,100,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・原子・分子・量子エレクトロニクス・プラズマ

キーワード：計算物理、原子・分子物理、数理物理

1. 研究開始当初の背景

原子・分子に光をあてると励起され、励起状態は光や電子を放出して崩壊する。近年における実験技術の向上は、中間状態の寿命を超える長時間の量子力学的な相関が光励起過程と崩壊過程の間に存在して、これが観測可能になったことを示した。そして、光励起状態の生成とその崩壊という二段階過程が、その素朴な意味においては成立しないこと

を示した。上記の二段階過程のモデルがどのように修正・精密化されるべきかを明らかにすることが、理論上の課題として認識されることとなった。他方、アト秒パルス光を用いた実験では励起と崩壊の間の時間相関を排除できる可能性がある。2種の互いにカウンターパートを担う実験を理論的に考察し、量子遷移について理解を深めるとともに、外場や衝突系内部の相互作用によって励起と崩壊の間の時間相関を制御する可能性を探る

ことが可能に成りつつあった。

2. 研究の目的

この分野の実験的研究は、Berlin の U. Becker のグループによって先鞭がつけられた (J. Viefhaus et al., Phys. Rev. Lett. Vol. 80 No. 8 (1998)). 量子光学の分野では 1970 年代から時間コヒーレンスを制御するアイデアが出されている (例えば、F. Shimizu, K. Umez, and H. Takuma, Phys. Rev. Lett. Vol. 47, No. 12 (1981), "Observation of Subnatural Linewidth in Na D2 Lines"). 本研究は、VUV 領域における実験技術の発展を受け、原子・分子の内殻励起に伴う時間領域のダイナミクスを探るもので、原子・分子やそのイオンの内殻励起状態のスペクトロスコーピーに新しい指針を与える。

3. 研究の方法

本研究においては、原子や原子イオンのエネルギー準位、振動子強度や Auger Rate の精密な値を計算する必要がある。さらに、時間領域のコヒーレンスを扱う為に大容量の計算が要求される。本補助金により、PC-ワークステーション一台をクラスターに追加し計算機環境の強化を図った。

Ar, Xe を始めとするいくつかの原子種に対して内殻励起状態の電子状態についておよびその崩壊過程についての、微細構造副準位を識別できる程度の精度での計算を行った。一般に、異なる微細構造副準位は異なる対称性に属するので、GRASP (General purpose Relativistic Atomic Structure Program) のような ab initio コードによる計算においてはそれぞれ別に計算し結果を比較することになる。したがって個々の計算は高精度であることが求められる。

寿命幅を超える実験的研究は緒についたばかりである。今後の発展は世界の主要な SR 施設の充実の程度にも依存する。そこで、世界の動向を知るため、いくつかの研究グループを訪問し必要な情報の収集をした。

寿命幅より狭いスペクトルが得られることは、既述のように、寿命より長い時間相関が存在することを意味する。普通の意味あいにおける 2 段階モデルは修正無しには使えない。本研究ではこのような干渉効果についてモデル化を行うと共に、数値計算によってモデルの正当性の検証をこころみた。

4. 研究成果

2005 年度は主として研究の環境を整えることに力を注いだ。

① PCワークステーション 1 台を既存のワークステーションのクラスターに追加し、計算機環境の強化を図った。ワークステーションは Intel Xeon 64bit CPU x 2 + MMU 4GB + 1.6TB RAID HDD からなるシステムを採用し、アプリケーションソフトウェアの 64bit 化に取り組んだ。

② カリウム原子のウインドウ型の共鳴光吸収スペクトルの生成メカニズムについて、time dependent な定式化を行い論文にまとめた。L-S 結合による、時間軸に沿った、スピンと軌道角運動量の migration がスペクトルの形を特徴付けることを議論した。

③ いくつかの原子種に対して内殻励起状態の電子状態について、および、その崩壊過程についての、微細構造副準位を識別できる程度の精度での計算を行った。このような目的に沿って、いくつかの計算を行い、主として多電子相関の観点から結果を纏めた。

④ 内殻励起の遷移確率振幅の間の時間相関についての干渉効果の表現のために、3 次元可視化ソフトウェアの利用技術を習得し、実際の利用に供すべくソフトウェアの整備を行った。

2006 年度は下記会議に参加し研究成果の発表を行うと同時に情報の収集を行った。

① 平成 18 年 7 月 16 日より 7 月 21 日まで、オーストリアのインスブルックで開催された第 20 回原子物理学国際会議 (The 20th International Conference on Atomic Physics) に出席して、ポスターセッションにて下記の原著発表を行った。

Title: Time Evolution of L-S Coupling Phase in Photon-Impact Induced Autoionizing States.

Author: F. Koike and M. Koide

2007 年度は下記会議に参加し研究成果の発表を行うと同時に情報の収集を行った。

① 平成 19 年 7 月 25 日より 7 月 31 日まで、ドイツのフライブルグ開催された第 25 回原子電子衝突物理学国際会議 (The 25th International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions) に出席してポスターセッションにて下記の原著発表を行った。

Title: Phoabsorption Spectra of Calcium

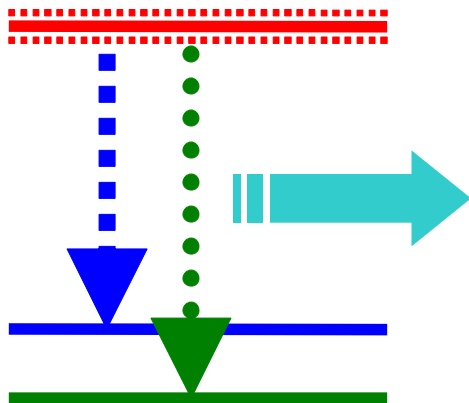
2008 年度は下記会議に参加し研究成果の発表を行うと同時に情報の収集を行った。
 ①平成 20 年 6 月 18 日より 6 月 20 日まで、ルーマニアのクルージュナポカで開催された第 4 回原子系における基礎過程についての会議 (The 4th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems (CEPAS)) に出席して講演を行った。

Title: TEMPORAL ASPECTS IN ATOMIC IONIZATIONS INITIATED BY ELECTRON OR PHOTON IMPACT”
 Author: F. Koike

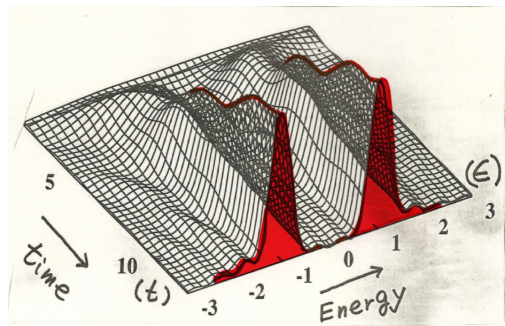
研究の成果は、以降に掲げるようにいくつかの論文に纏められ、量子遷移過程を理解する上で精密な非経験的計算がきわめて重要な役割を果たすこと、そして、Time Dependent な取り扱い法の開発が重要であることの認識に向けての端緒を示すことができた。

要点は次のとおりである。

一般に、下図のように量子遷移にあたって 2 つ以上の準位が同時に遷移する場合、



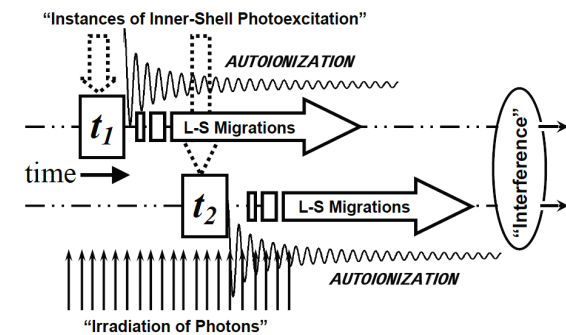
量子遷移の間に干渉が起こる。この量子遷移が例えば自動電離過程であれば、電離電子のエネルギースペクトルの中に干渉の効果が観測される可能性がある。干渉の時間経過を追うと下図のようなスペクトルが得られる。



この図の作成にあたっては、2 つのエネルギー準位を考え、準位間のエネルギー差を原子単位で 2、自動電離のエネルギー幅を原子単位で 0.2、とした。時間軸も原子単位で記してある。図は、遷移確率振幅の絶対値の 2 乗の 3 次元プロットである。時間経過とともに 2 つの準位からの遷移振幅の干渉が進み、2 つの通常見られるローレンツ型のピークに収束していくことがわかる。自動電離準位の寿命が無限大であれば、すなわち自動電離のエネルギー幅が 0 であれば最終的に得られるスペクトルは 2 つの幅の無い線スペクトルになる。自動電離準位の寿命が有限であれば、すなわち自動電離のエネルギー幅が有限であれば、遷移振幅の干渉過程は有限時間で終わり、寿命に応じたエネルギー幅の線スペクトルが得られる。

上記の考察は、ある時刻に励起状態が用意されて、その時刻から自動電離が始まるという仮定と、もうひとつ、異なる時刻に用意された励起状態は互いに非干渉的であるとの仮定の上に成り立っている。

ところが、一般に励起状態の生成も量子過程であり、したがって、例えば、1 光子吸収で異なる時刻に用意される励起状態の振幅は互いに時間相関を持つ。スピン・軌道相互作用による準位分裂を持つ系の光吸収とそれに引き続く自動電離の時間経過の模式図を示すと下図のようになる。



時刻 t_1 と t_2 に作られた励起状態の確率振幅は互いに時間相関を持ち $|t_1 - t_2|$ の値が励起状態の寿命より短い範囲でならば自動電離の確率振幅は互いに干渉してもおかしくない。スピン・軌道相互作用による角運動量の歳差運動の周期が励起状態の寿命より短いならば、LS 表現の下で禁止になる状態への励起や自動電離が起こりえることになる。

本研究では量子系の時間発展をシステマティックに追うことにより、量子状態間の干渉に起因するさまざまな効果が干渉可能であることを示した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 12 件)

- ① E. Koike, “Time dependent aspects in the ionizations following atomic photoexcitations”, Nucl. Inst. and Meth. **B267**, 231-234 (2009) 査読有。
- ② Dae-Soung Kim, Fumihiko Koike, “Irregularity of Autoionizing Rydberg Series in Photoionization Leading to the Si³⁺ 3I States from the Mg-Like Si²⁺ Ions” J. Phys. Soc. Jpn. **77** 124302-1-12 (2008) 査読有。
- ③ Xiaobin Ding, Chenzhong Dong, Fumihiko Koike, Takako Kato, Stephan Fritzsche, “Excitation and decay dynamics of 1s2s inner-shell double-vacancy states of neon atoms” Chinese Physics **B17**, 0592-0598 (2008) 査読有。
- ④ E. Koike and S. Fritzsche, “MCDF Calculations for EUV-emissions of 4d-open shell ions based on the features of non-local exchange integrals”, J. Phys. Conf. Series **58**, 157-160 (2007) 査読有。
- ⑤ M. Oura, Y. Tamenori, E. Koike, T. Hayaishi, H. Yamaoka, T. Koizumi, K. Takahiro, K. Kawatsura, T. Mukoyama, “Study of nonradiative decay properties following resonant double excitation to the [1s2p]nln010 states of Ne atom using soft X-ray undulator radiation”, Radiation Physics and Chemistry, **76**, 469-474(2007) 査読有。
- ⑥ Fumihiko Koike, Chenzhong Dong, “Many electron correlations and dynamics in atoms and multi-charged atomic ions”, J. Phys. Conf. Series **72**, 012012-1-8 (2007) 査読有。
- ⑦ Fumihiko Koike, Stephan Fritzsche, “Relativistic calculations for highly correlated atomic and highly charged ionic systems”, Radiation Physics and Chemistry, **76**, 404-411

(2007) 査読有。

- ⑧ Fumiko Yoshida, Fumihiko Koike, Satoshi Obara, Yoshiro Azuma, Tetsuo Nagata, Shuichi Hasegawa, “1s(2s2p 1P)2Pnl, 1s(2s3s 3,1S)2Snp, and 1s(2s3p 1P)2Pns K-shell photoexcited Rydberg series of beryllium atoms”, Phys. Rev. **A75**, 012714-1-11 (2007) 査読有。
- ⑨ Shuichi Hasegawa, Fumiko Yoshida, Leo Matsuoka, Fumihiko Koike, Stephan Fritzsche, Satoshi Obara, Yoshiro Azuma, and Tetsuo Nagata, “Photoexcitation of K-shell and L-shell Hollow Beryllium” Phys. Rev. Lett. **97**, 023001 (2006) , 査読有。
- ⑩ E. Koike, S.F., K. Nishihara, A. Sasaki, T. Kagawa, T. Nishikawa, K. Fujima, T. Kawamura and H. Furukawa, “Accurate calculations of electronic transitions in heavy atomic ions relevant to extreme ultra-violet light sources”, Journal of Plasma and Fusion Research Series, **7**, 253-255 (2006) 査読有。
- 11 M. Koide, E. Koike, Y. Azuma and T. Nagata, “Split window resonances for the photoionization of spin-orbit coupled subshell states in alkali atoms”, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, **144-147**, 55-57 (2005), 査読有。
- 12 E. Koike, Y. Azuma, S. Hasegawa, T. Nagata and K. Nishihara, “Multi-electron correlations in atomic or ionic excited states”, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **144-147**, 1227-1228 (2005) 査読有。

[学会発表] (計 3 件)

- ① E. Koike “TEMPORAL ASPECTS IN ATOMIC IONIZATIONS INITIATED BY ELECTRON OR PHOTON IMPACT”, The 4th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems (CEPAS) 2008年6月20日 Cluj-Napoca Rumania

- ② M. Koide, E. Koike et al, "Photoabsorption Spectra of Calcium 3p Multiple Shakeup Resonances". The 25th International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions
2007年7月24日 Freiburg, Germany
- ③ E. Koike and M. Koide "Time Evolution of L-S Coupling Phase in Photon-Impact Induced Autoionizing States" The 20th International Conference on Atomic Physics, 2006年7月20日, Innsbruck, Austria

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小池 文博 (KOIKE FUMIHIRO)
北里大学・医学部・准教授
研究者番号：90095505

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし