

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

成 25 年 5 月 31 日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2009～2012

課題番号：21540406

研究課題名（和文） 散乱方程式直接解法の新展開

研究課題名（英文） Novel method for direct numerical solution of scattering equations

研究代表者

戸嶋 信幸（TOSHIMA NOBUYUKI）

筑波大学・数理物質系・教授

研究者番号：10134488

研究成果の概要（和文）：

従来の微分方程式を境界条件のもとで解く手法では全く解けなかった数万から数十万のチャンネルが寄与する散乱問題に対して、境界条件の代わりに初期条件として因果律を取り込んだ時間依存積分方程式に変換し、その積分方程式をグリッド上で発展させる直接解法を開発することによって解決した。当初は散乱問題の一般的解法として始めたが、研究を続けるに従って短パルス強レーザー場中の原子分子ダイナミクスにも適用可能であることが判明し、さらなる発展を遂げた。

研究成果の概要（英文）：

Novel method was developed for solving scattering equations of the processes in which hundreds of thousand channels are coupled. Those processes can never be solved by the traditional method in which scattering differential equations are solved as a boundary-condition problem. In our method the Schroedinger equations is converted to a time-dependent integral equation and it is solved as an initial-condition problem corresponding to the causality using the direct integration method on the grid representation. On the way of the research, the procedure turned out to be applicable to wide physical processes other than the scatterings and it was successfully applied to the dynamics of atoms and molecules in short-pulse strong laser fields.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2010年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2011年度	400,000	120,000	520,000
2012年度	300,000	90,000	390,000
年度			
計	3,700,000	1,110,000	4,810,000

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

キーワード：原子・分子、散乱理論、反陽子捕獲、再散乱過程、短パルス強レーザー

1. 研究開始当初の背景

時間にあらわに依存しない相互作用ポテンシャル中の散乱問題は従来定常状態の波動微分方程式として、(a)原点で正則、(b)

無限遠点で入射状態の平面波+球面散乱波の2つの境界条件を満足させる解を求める。多チャンネル問題でこの要求を満たすには次の煩雑なステップをとることになる。チ

チャンネル数を n とすると、

- 原点の境界条件を n 通りにとって (たとえばあるチャンネル波動関数が 1 で他は 0)、 n 元連立微分方程式を n 回繰り返して解き、 n 組の独立解を求める。
- この n 組の解の線形結合をとり、無限遠点 (実際には十分遠い点) で始状態の入射チャンネルのみ平面波 + 外向き球面波、他の成分は外向き球面波のみの境界条件を満たす解を求める。
この手法はチャンネル数が数万になる多チャンネル問題の場合には適用不可能であった。

2. 研究の目的

散乱方程式をチュー・ゴールドバーガー積分方程式に変換し、境界条件を時間依存方程式の初期条件として取り込むことにより多チャンネル問題の困難を解決することを目的とする。時間依存方程式として解く手法には他に波束電波法があるが、この方法は異なるエネルギー状態の重ね合わせとして記述するため精度を上げることが困難であった。

3. 研究の方法

グリーン関数の球面波部分の振る舞いを与える無限小のパラメータは微分方程式に書き換えた途端消滅し、無限遠点で波動関数に課された境界条件となる。しかし、時間依存の積分方程式に書き表すと因果律を反映した初期条件として取り込まれるため n 組の連立微分方程式の解を求める手順が不要となる。我々の計算では、この時間依存積分方程式をグリッド上で展開した直接法を基にして、スプリットオペレータ法により解を求める。

4. 研究成果

(1) 反陽子捕獲

反陽子が水素原子によって捕獲される過程の断面積を我々は本研究で開発した新手法によって以前求めたが、用いた V 座標系 (唯一の近似である) によってかなりのエラーが含まれることを指摘した論文が出版された。我々はこれに対して厳密なヤコビ座標系を用いて大規模計算を行い、 V 座標系はこの系に対して十分正確であることを示した。また、我々の論文を批判した論文に求められたヘリウムイオンに対する共鳴エネルギーは逆に不正確でエラーを含んでいることを指摘した。

(2) 強レーザー場と水素分子の相互作用
この直接解法を水素分子イオンに適用することにより、クーロン爆発後の陽子の運動量分布を求め、実験値とのよき一致を得、3 光子共鳴がピーク値を与える原因であること

を突き止めた。レーザー場中に二原子分子をおきその核軸とレーザー場の偏光方向を変化させると分子の電離確率が大きく変化するが、従来の理論である ADK 理論では実験値を説明できない。我々は直接法により方程式を解いて電離確率を求め、実験値と良い一致を得た。この結果、ADK 理論が不一致である原因が展開係数が不正確であることによることを突き止めた。強レーザーによる水素分子イオンの高次高調波生成を直接解法により調べた。分子軸とレーザー場の偏極方向との間の角を変化させると特定の角度で 3 次の高調波が著しく減少することを見出した。この角度は核間距離に依存して変化し、分子の対称性に起因していることを示唆しているが、 σ 状態を π 状態間の干渉によって誘発双極子が相殺を起こすことが原因であることを見出した。

(3) 二色レーザーによる原子過程の制御
 10^{-18} 秒短パルスレーザーと赤外光との組み合わせによって、ヘリウム原子を電離すると、電離確率がレーザー光と赤外光との間の時間差の関数として振動し、その原因がことなるパルス列間の電子による干渉であることが実験の論文で示されていたが、我々は精密計算を行うことにより、単パルスでも振動は起こり、干渉は Floquet 状態を中間状態とする複数の経路の干渉によって起こることを示した。極紫外レーザーと遠赤外レーザーを組み合わせると、2 つのレーザーの間の位相差を変えることによって原子の電離確立を制御できることを見出した。しかも、この電離確率は極紫外レーザーの強度によっても変化し、原子を用いた光スイッチへの可能性を示唆している。フェムト秒レーザーと極紫外の共存場による原子は極紫外光子のエネルギーが電離エネルギーより低い場合でも多光子吸収によって電離が可能である。しかし極紫外場を二重にすることによって原子がレーザー光に対して完全に透明となることを実験および理論の共同研究により示した。希ガス原子の ns 内殻はオージェ効果によってふさぐことができない。これはもう一個の電子を電離するのに必要なエネルギーが足りないためであるが、赤外レーザーを付加することによって誘発することが可能である。我々はこの効果をうまく利用すればこの過程を著しく増大させることが可能であることを示した。多価イオンの二電子性再結合においては相対論的な効果として電子間の相関に対応するブライト相互作用が重要であることが予想される。しかし、ブライト相互作用の寄与を実験的に検証することはきわめて困難であったが、我々は理論計算により明確にその効果を取り出す手法を考案した。実験家との共同研究により、金の三電子系多価イオンにおいてはじめてその実

証に成功した。これらの一連の研究は、我々が考え出した散乱状態の直接解法により初めて実現が可能となったものである。

(4) 振動磁場中の原子による光吸収互いに直交する振動磁場と静磁場が原子にかかるとそのエネルギー構造に新奇な特異性を示すことが摂動論によって提示されていたが、2次のゼーマン項まで入れた計算ではどのようなことになるがわかっていなかった。我々は開発した直接解法により、磁場が強い場合での振る舞いをはじめて解析することに成功した。レーザー場中の原子分子にプローブ光をあてて吸収を調べるにはフロッケ状態をまず求め、その間の遷移確率を計算するのは常套手段であるが、レーザー強度が大きい場合膨大な計算時間を要し、現実的ではない。これに対して双極子演算子を始状態にかけた状態を時間発展させ、その波動関数から自己相関関数を求める新手法を開発した。この手法により高い励起状態への吸収過程も精度よく計算できるようになった。

(5) ヘリウム原子の二重イオン化レーザーによるヘリウム原子の2重イオン化は、強度が中程度以下の場合に電子が独立に続けて電離するとして計算した値と何桁も合わなくなることが知られている。この現象は最初に電離した電子がレーザー場によって親原子に引き戻され、再散乱を起こすと考えた機構によって説明されている。しかし、定量的な計算は古典力学によるものしかなく、量子論的な計算はこれまで実現されていなかった。これに対して我々が開発した直接解法をもちいることにより、量子論的な計算にはじめて成功した。ほぼ実験値を再現するとともに実験値では明確でなかった構造が電離確率に見出された。

(6) キャリア位相の電離に対する影響数フェント秒の短パルスレーザーを原子にあてて電離する時、キャリアの位相によって光子の進行方向に対する左右の電離確率が大きく変化することを以前我々の研究で示したが、今回はこの過程を利用して、精密な理論計算を実験値を比べることにより、実験に用いられたレーザーの位相を正確に決定できること示した。また、この短パルスレーザーの継続時間にも電離確率の非対称性は大きく依存し、理論計算から決定可能であることを示した。

(7) 再散乱過程の解析キセノンからの短パルスレーザーによる電離電子の角分布から再散乱過程で何度親イオンを通過したか、最初のトンネル電離は後の位置で起こったかの詳細な情報を得る方法を考案し、実験値の解析を行った。アット秒の超短パルスレーザー列を用いることにより、ヘリウム原子の電離に関して異なるフロッケ状態を経た経路間の干渉が起こるこ

とを示し、実験家との共同研究により実証した。また、この電離に二色レーザーを用いて時間差を与えることにより、電離率が振動することを示した。閾値超え電離のスペクトルのうち、低エネルギーの成分は再散乱過程においてクーロン相互作用による集極化の影響を強く受けることを見出した。このため、従来用いられている強レーザー場の近似は低エネルギー電子に対して不相当であることが判明した。

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 23 件)

1. N.Shivaram, H.Timmers, X.M.Tong, and A.Sandhu,, Photoionization dynamics in the presence of attosecond pulse trains and strong fields, *Chemical Physics*, 査読あり、414, 2013, 139-148, DOI: 10.1016/j.chemphys.2012.05.006
2. C. Lemmel, J. Burgdorfer,..., X.M. Tong, Classical-quantum correspondence in atomic ionization by midinfrared pulses: Multiple peak and interference structures, *Physical Review A*, 査読あり、87, 2013, 013421-1-9 DOI: 10.1103/PhysRevA.87.013421
3. D.D.Hickstein,...,X.M.Tong,...N.Toshima,... H.C.Kapteyn, Direct visualization of laser-driven electron multiple-scattering and tunneling distance in strong-field ionization, *Physical Review Letters*, 査読あり、109, 2012, 073004-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.073004
4. N.Shivaram, H.Timmers, X.M.Tong, and A.Sandhu, Attosecond-Resolved Evolution of a Laser-Dressed Helium Atom: Interfering Excitation Paths and Quantum Phases, *Physical Review Letters*, 査読あり、108, 2012, 193002-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.193002
5. Z.Hu, X.Han, Y.Li, D.Kato,,X.M.Tong and N.Nakamura, Experimental Demonstration of the Breit Interaction which Dominates the Angular Distribution of X-ray Emission in Dielectronic Recombination, *Physical Review Letters*, 査読あり、108, 2012, 073002-1-4, DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.073002
6. M.H.Xu, ...,X.M.Tong,...A.F.Starace, Attosecond Streaking in the Low-Energy Region as a Probe of Rescattering, *Physical Review Letters*, 査読あり、107, 2011, 18301-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.183001

7. Y.J.Jin, X.M.Tong, and N. Toshima, Anomalous alignment dependence of the third-order harmonic of H_2^+ ions in intense laser fields, *Physical Review A*, 査読あり、86, 2012, 053418-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevA.86.053418
 8. N.Shivaram, H.Timmers, X.M.Tong, and A.Sandhu, Measurement of the absolute timing of attosecond XUV bursts with respect to the driving field, *Physical Review A*, 査読あり、85, 2012, 051802-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevA.85.051802
 9. C.Lemell,...X.M.Tong,...and .Graeffe, Low-energy peak structure in strong-field ionization by mid-infrared laser-pulses: two-dimensional focusing by the atomic potential, *physical Review A*, 査読あり、85, 2012, 011403-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevA.85.011403
 10. X.M. Tong, and N. Toshima, Mass polarization effect on the resonant energies of $p\text{-bar-He}^+$ ions and the protonium formation in low-energy antiproton-hydrogen-atom collisions, *Physical Review A*, 査読あり、85, 2012, 032709-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevA.85.032709
 11. T. Tabe, N. Ono, X.M. Tong, and N. Toshima, Laser-information encoded in atomic asymmetric ionization in few-cycle laser fields, *Physical Review A*, 査読あり、84,2011, 023409-1-6, DOI: 10.1103/PhysRevA.84.023409
 12. X.M. Tong, P. Ranitovic,...N. Toshima, Theory and experiment on laser-induced inner-valence Auger decay of rare-gas atoms, *Physical Review A*, 査読あり、84,2011, 013405-1-8, DOI: 10.1103/PhysRevA.84.013405
 13. Y.J. Jin, X.M. Tong and N. Toshima, Alignment-dependent ionization of hydrogen molecules in intense laser fields, *Physical Review A*, 査読あり、83, 2011, 063409-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevA.83.063409
 14. P. Ranitovic, X.M. Tong,.....N. Toshima,..., H.C. Kapteyn, Controlling the XUV transparency of Helium using two-pathway quantum interference, *Physical Review Letters*, 査読あり、106,2011, 193008-1-4, DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.193008
 15. P. Ranitovic, X.M. Tong,.....N. Toshima,..., and H.C. Kaptey, Laser-enhanced Auger Decay in rare-gas atoms, *Physical Review Letters*, 査読あり、106, 2011, 053002-1-4, DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.053002
 16. T. Ishikawa, X.M. Tong and N. Toshima, Double ionization of He in an intense laser field via a rescattering process, *Physical Review A*, 査読あり、82, 2010, 033411-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevA.82.033411
 17. X.M. Tong and N. Toshima, Controlling atomic structures and photoabsorption processes by an infrared laser, *Physical Review A*, 査読あり、81, 2010, 063403-1-4, DOI: 10.1103/PhysRevA.81.063403
 18. X.M. Tong and N. Toshima, Infrared-laser assisted photoionization of helium by coherent extreme ultraviolet light, *Physical Review A*, 査読あり、81, 2010, 043429-1-6, DOI: 10.1103/PhysRevA.81.043429
 19. X.M. Tong, P. Ranitovic, C.L. Cocke, and N. Toshima, Mechanisms of infrared-laser-assisted atomic ionization by attosecond pulses, *Physical Review A*, 査読あり、81, 2010, 021402-1-4, DOI: 10.1103/PhysRevA.81.021404
 20. Y.J. Jin, X.M. Tong, and N. Toshima, Enhanced ionization of hydrogen molecular ions in an intense laser field via a multiphoton resonance, 査読あり、81, 2010, 013408-1-6, DOI: 10.1103/PhysRevA.81.013408
 21. T. Shirahama, X.M. Tong, K. Hino, and N. Toshima, Atomic photoabsorption process controlled by static and oscillating magnetic fields *Physical Review A*, 査読あり、80, 2009, 043414-1-4, DOI: 10.1103/PhysRevA.80.043414
 22. X.M. Tong, N. Nakamura, S. Ohtani, T. Watanabe and N. Toshima, Green's function for multielectron ions and its application to radiative recombination involving dielectronic recombination, *Physical Review A*, 査読あり、80, 2009, 042502-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevA.80.042502
 23. K. Sasaki, X.M. Tong and N. Toshima, Coulomb focusing effect on the space distribution of the rescattering electron wave packet in the laser-atom interaction, *Journal of Physics B*, 査読あり、42, 2009, 165603-1-4, DOI: 10.1088/0953-4075/42/16/165603
- [学会発表] (計 17 件)
1. X.M.Tong and N.Toshima, Controlling atomic photoabsorption processes by mid-infrared lasers, 10th Asian Int. Seminar on Atomic and Molecular Physics, 2012年10月25日, 台湾国立大学、台北、台湾

2. Y.J.Jin, X.M.Tong and N.Toshima, Anomalous alignment dependence of the third order harmonics from H_2^+ ions in intense laser fields, 2012年8月30日, Berlin, ドイツ
 3. X.M.Tong and N.Toshima, Protonium formation in low-energy antiproton-hydrogen-atom collisions A case study of the V-coordinates with the mass polarization tem, Int. Conf. Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, 2012年8月30日, Berlin, ドイツ
 4. 全曉民, 戸嶋信幸, 水素原子による反陽子捕獲のヤコビ座標を用いた精密計算、日本物理学会 2012 年年次大会、2012 年 3 月 24 日、関西学院大学
 5. P. Ranitovic, X.M. Tong,.....,N. Toshima,..., H.C. Kapteyn、Controlling the XUV transparency using two-pathway quantum interference、27th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions、2011 年 8 月 2 日、Queen's University (Belfast, 英国)
 6. Y.J. Jin, X.M. Tong and N. Toshima、Alignment dependent ionization of H_2 molecules in intense laser field、27th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions、2011 年 8 月 1 日、Queen's University (Belfast, 英国)
 7. X.M. Tong, P. Ranitovic,,and N. Toshima, , Infrared laser enabled sub-shell Auger decay of Ar atoms, 3rd international Conference of Attosecond Physics, 2011 年 7 月 8 日、北海道大学
 8. Y.J. Jin, X.M. Tong and N. Toshima、Alignment dependent ionization of H_2 molecules in intense laser field、12th International Conference on Multiphoton Processes、2011 年 7 月 5 日、北海道大学
 9. T.Tabe, N.Ono, X.M. Tong, and N. Toshima、Information encoded in carry-envelope-phase dependent ionization、12th International Conference on Multiphoton Processes、2011 年 7 月 5 日、北海道大学
 10. 金英俊、全曉民、戸嶋信幸、パルスレーザーによる水素分子電離確率の偏光軸方向依存性、日本物理学会 2011 年年次大会、2011 年 3 月 25 日、新潟大学
 11. 石川倫大、全曉民、戸嶋信幸、再散乱過程によるヘリウム原子 2 重電離の理論研究、日本物理学会 2010 年秋季大会、2010 年 9 月 25 日、大阪府立大学
 12. 佐々木康祐、全曉民、戸嶋信幸、強レーザー場中における再散乱電子の空間分布、日本物理学会 2009 年秋季大会、2009 年 9 月 27 日、熊本大学
 13. 金英俊、全曉民、戸嶋信幸、強レーザー場中における水素分子イオンのクーロン爆発、日本物理学会 2009 年秋季大会、2009 年 9 月 27 日、熊本大学
 14. 全曉民、Fano 共鳴理論の新展開、日本物理学会 2009 年秋季大会、2009 年 9 月 26 日、熊本大学
 15. Y.J. Jin, X.M. Tong and N. Toshima、Ionization of hydrogen molecular ion in an intense laser field, Conference on computational physics 2009, 2010 年 12 月 17 日、高雄、台湾
 16. T. Shirahama, X.M. Tong, K. Hino and N. Toshima、Controlling the atomic photo-excitation by a periodic magnetic field, Conference on computational physics 2009, 2010 年 12 月 17 日、高雄、台湾
 17. X.M. Tong and N. Toshima、Time-dependent method in the laser-atom interactions, Conference on computational physics 2009, 2010 年 12 月 17 日、高雄、台湾
- [図書] (計 1 件)
1. 戸嶋信幸、理工図書、量子力学、2011 年 344 ページ
- [その他]
ホームページ等
<http://vivaldi.bk.tsukuba.ac.jp/index.htm>
6. 研究組織
- (1) 研究代表者
戸嶋 信幸 (TOSHIMA NOBUYUKI)
筑波大学・数理物質系・教授
研究者番号：10134488
 - (2) 研究分担者
トン ショウミン (TONG XIAO-MIN)
筑波大学・数理物質系・准教授
研究者番号：80422210