

# 一様静電場中の原子・分子のトンネルイオン化の弱電場漸近理論

森下 亨 (電気通信大学量子科学研究センター toru@pc.ucc.ac.jp)

原子や分子に一様静電場を印加すると、原子・分子ポテンシャルと電場によって形成される障壁を電子が貫いて外部に飛び出すトンネルイオン化が起こる。トンネルイオン化は、原子・分子・光物理学における基礎的な研究課題の1つであり、量子力学の主要な枠組みが完成された直後より現在に至るまで精力的に研究されている。

基底状態にある原子・分子に対してトンネルイオン化が実験で観測可能となるのに必要な強静電場 ( $0.1$  原子単位,  $5 \times 10^8$  V/cm 程度) を作ることは非常に難しく、長い間理論研究が先行していた。しかし、ムルとストリックランドのチャープパルス増幅法 [2018年ノーベル物理学賞, 加藤義章, 森芳孝, 日本物理学会誌 **75**, 139 (2020)] の発明により状況が変わった。実験室レベルでトンネルイオン化を起こすほどの強電場が極短時間ではあるが (といっても原子・分子内電子にとっては十分長い時間) 容易に得られるようになり、トンネルイオン化が電場強度や原子・分子の構造にどのように依存するか実験的に調べられるようになった。最近では、トンネルイオン化は分子内電子の電荷分布を調べるツールとしても利用されている。

一様静電場中のイオン化の場合、電子は電場と逆向きに加速され続ける。これに対して実験で扱われているレーザー電場中のイオン化では、飛び出した電子が振動するレーザー電場にゆすぶられて親イオンと衝突する場合がある。これは再衝突過程とよばれ様々な興味深い現象を引き起こす。再衝突過程のうち、電子と親イオンの再結合によって生じる高次高調波発生過程は、水の窓領域のX線や数十アト秒の極短パルスといった新しい光源として有用であり、高強度化などの研究が進められている。また、トンネルイオン化をポンプ過程、弾性および種々の非弾性の再衝突をプローブ過程とする、レーザーの1周期以内で起こる

1フェムト秒程度の超高速実時間分析といった研究も行われている。こうした再衝突過程を含む様々な高強度レーザー場中の原子・分子過程を理解し、また、新しい実験・計測手法を開発するために、トンネルイオン化についての精確な理論が必要とされている。

一様静電場中の原子・分子のトンネルイオン化は、単位時間当たりのイオン化確率であるイオン化レートで特徴づけられる。これは、対応するシュレーディンガー方程式を適切な境界条件のもとで解くことにより得られる。しかし、最も基礎的な水素原子についてすら、放物座標で変数分離が可能であるにも関わらず、解析解は存在しない。そのため、できるだけ高精度の近似理論および数値計算が要求される。代表的な手法の1つであるシュレーディンガー方程式の直接数値解法は、少数電子系に対して有効である。H, He, Liの1-3電子原子、そして原子核の位置を凍結した近似のもとで $H_2^+$ ,  $H_2$ の1-2電子分子について精密計算が実行された。これらの計算結果のいくつかは、対応する実験と比較され有用な知見をもたらした。もう1つの理論手法は、電場強度  $F \rightarrow 0$  の弱電場極限 (といってもトンネルイオン化が観測される程度の強電場) での漸近展開によってトンネルイオン化を記述する手法である。イオン化レートの漸近展開に現れる展開係数は、エネルギーの摂動展開の係数である双極子モーメントや分極率と同様に物質固有の量であり、強電場と物質との相互作用に有益な知見を与える。そして、高強度レーザーに関連する物理過程の深い理解や予測に対して有効に活用される。

我々は、最近、漸近展開の係数を決定する弱電場漸近理論を構築し、様々な系に適用して調べている。この理論が高強度レーザー場中の原子・分子過程の理解に役立つことを期待する。

## 用語解説

### トンネルイオン化:

電場によって歪められて生じたポテンシャル障壁をトンネル効果によって電子が透過してイオン化が起こること。イオン化確率は電場強度に対して強い非線形を呈し、また、原子・分子の構造に依存する。

### 再衝突過程:

高強度レーザーを原子・分子に照射することによって引き起こされる高次非線形過程の1つ。振動するレーザー電場中でトンネルイオン化によって原子・分子から飛び出した電子が、電場によって加速され、レーザーの位相の反転に伴い元の位置に戻ってきて親イオンと衝突することを再衝突という。再衝突が弾性衝突の場合に高エネルギーの光電子を生じ、親イオンとの再結合の場合に高次高調波を発生する。その他、親イオンの励起やイオン化など、様々な衝突過程が研究されている。再衝突過程は、再衝突の際の原子・分子の量子状態の情報を含むので、分子の構造解析にも利用される。[例えば、森下亨, 日本物理学会誌 **64**, 544 (2009)] また、再衝突過程を制御して、数十アト秒の単一光パルスを発生させることができる。

### アト秒:

1アト秒 =  $10^{-18}$  s である。水素原子の基底状態の古典周期は150アト秒であり、アト秒は、原子・分子内の電子の運動の時間を表すのに使用される。電子運動のアト秒時間スケールは、典型的な高強度レーザーである近赤外光の周期 (数フェムト秒, 1フェムト秒 =  $10^{-15}$  s) に比べて極めて短い。したがって、高強度レーザー場中では、ゆっくりと振動する強電場中を電子が追従するという、断熱的描像が成り立つ。