

出張報告書

2006年11月14日

量子物質工学専攻 渡辺信一研究室 豊田広大

1. 出張先

カンザス州立大学、Chii-Dong Lin研究室

2. 出張期間

2006/8/8 – 2006/9/28

3. 出張目的

強光子場物理を研究するための数値計算技術の開発

4. 概要

カンザス州立大学 (Kansas State University、以下KSU) のChii-Dong Lin教授の招待で上記の日程でKSU₂に研究目的で滞在する機会を得た。カンザス州はアメリカ中西部に位置し、総面積21万m²は日本の総面積の約半分、また時差は15時間である。KSUが位置するマンハッタン市までは成田空港から15時間以上掛かったと記憶している。滞在中はChii-Dong Lin教授の研究室にて、特に渡辺信一研究室の助手の森下亨先生の指導の下研究をした。

5. Chii-Dong Lin研究室について

Chii-Dong Lin研究室は元来原子衝突の理論を研究してきたが、最近は強光子場中の原子・分子の研究へとシフトしてきているようである。訪問時、Lin教授の他に4人の研究者が滞在していたがいずれもこの分野を研究している方々であった。そして特に近年は超短パルスによる原子・分子のイオン化のダイナミクスおよび高調波発生の研究に力を入れている。4人すべての方から研究の内容を聞いたが特にDr. Hoang Leの研究が興味深かったので紹介する。

Hoang博士の現在の研究題目は超短レーザーを用いた分子（酸素分子、窒素分子等）のイメージングである。分子（または原子）にレーザー光が入射すると、それから元の入射レーザーよりも波長の短い光が放出されることが知られている。これをHigh Harmonic Generation(通称HHG)というが、このHHGスペクトルから対象分子の波動関数をprobeするための分析手法を開発するのが目的である。簡単に概要を説明すると以下ようになる。

(i) 実験で測定されるHHGスペクトル $S(\omega, \theta)$ を分子軌道法によって求めた波動関数を用いて計算する。ここで ω はHarmonic Order、 θ は偏光方向からの角度である。

(ii) 強光子場近似を用いてスペクトル S より分子のダイポールモーメント $d(\omega)$ を求める。

(iii) d は分子の波動関数を用いてと表されるので、この式

を逆フーリエ変換をすることで波動関数を求めることができる。

6. Kansas Light Source(KLS)

2001年、物理学科のProf. Zenghu Changのグループが主導で設立した高強度・超短パルス源の設備をKansas Light Source(KLS)といい、これを用いた原子・分子と高強度・超短パルスとの相互作用の研究が盛んに行われている。今回、幸運にもKLSのChang教授の下でポスドクをしている増子拓紀(ましこひろき)博士と懇意になり、実験設備を見学する機会を得た。増子博士自身は超短パルスの生成グループに所属しており、当日は特に高調波発生 of 基礎的な話および実験技術について詳しく聞かせて頂いた。Chang研究室の現在の主要な課題はX線ストリークカメラ、高調波発生、アト秒パルスの生成などである。

(i) X線ストリークカメラ

X線アト秒パルスを用いて、赤外超短パルスのパルス幅などの測定に使用する。Chang研究室では200asの時間分解能を目標としている。

(ii) 高調波発生

高次高調波の効率的な発生および応用を目指している。例えば、波長2nmの高調波は水に対しては透過だが、カルシウムに対しては透過でないため、生体イメージング等への応用が期待されている。

(iii) アト秒パルスの発生

特に単一のアト秒パルスの生成に力を入れている。ターゲットガス(Chang研ではAr、Xe、Krなどを主に使っている)にレーザーを入射させる時ゲートをかけ(キャリアの一周分だけを取り出すようにする)、原子のイオン化によって生じた電子が核に一回だけ衝突するようにする。Chang研では200as程度のパルスの生成を目標としている。

他にも実験の基礎的な技術等の解説も懇切丁寧にして下さった。とても有意義な時間だった。

7. 研究報告

先に述べた通り、現地では森下享先生の指導の下研究を行った。内容はパルスと原子・分子との相互作用の研究をするための数値計算技術の開発をした。数値計算では有限の広さの空間しか表現できないため波束の時間発展を考えた時、空間の端から非物理的な反射が生じてしまう。しかしTolstikhinはSiegert擬状態(Siegert pseudo state、以下SPS)という空間の端で外向波の境界条件を満たす波動関数で波束を展開することにより非物理的な反射を除去した波束の時間発展に成功した[1]。しかし、波束の展開基底は完全系を張る関数系であれば何でもよく、SPSの代わりにB-spline基底関数(B-spline basis function、以下BS)を使う方法を開発することにした。SPSは考えている空間の全域で振幅を持つが、BSはある特定の(空間の)分点間でしか振幅を持たないlocalizeした関数である。そのため行列をBSで表示した場合それはsparse(疎)になるため時間発展の計算時間の短縮につながる。そしてこ

れは多次元の問題を考える時に非常に有用になると考えている。より現実に近い物理の問題を解きたいならば少なくとも2次元は欲しい。例えば水素分子陽イオンで、プロトン間の距離 (R) とプロトン間の midpoint から電子までの距離 (r) を自由度に選ぶとこれは最も簡単な2次元系であるものの、解離とイオン化を同時に扱えるため非常に面白いと考えている。残念ながら現地では開発が終わらなかったが、帰国後プログラムが完成し、現在はテストの最中である。

Reference

[1] O. I. Tolstikhin, Phys. Rev. A73, 062705(2006).

8. 総括

今回の出張はとても有意義でした。研究面だけではなく、現地で様々な人々に出会えたのもまた大変有益でした。最後になりますが今回の出張を全面的にサポートして下さった電通大21世紀COEに感謝の意を表します。