

# 高強度短波長レーザー光中の原子ダイナミクス理論

東京大学大学院工学系研究科・助教授 石川 顕一

## 1. 本研究分野の概要

高次高調波や自由電子レーザーに代表される新しい極端紫外および軟エックス線光源（高強度短波長レーザー光源）の出現は、光と物質の相互作用研究の新しい扉を開くものと期待されている。これは、学術的に興味深いというだけではなく、原子・分子ダイナミクスや化学反応の制御、生体分子イメージングなどの将来の光科学技術の基盤として注目されている。従来の光による原子のイオン化 [1] とは対照的に、高強度短波長レーザー光源の応用においては、非線形光学効果や複数の電子の相関が重要な役割を果たしていることが多い。このような現象を理論的に研究するには、コンピューターを用いて時間依存シュレーディンガー方程式の数値解を直接求めるのが最良の選択である。

膨大な計算時間とメモリーを必要とするこのようなアプローチは十数年前までは夢物語に過ぎなかったが、コンピューター技術の進歩にともない、まず 1990 年代に 1 電子系（水素原子）に応用され、超閾電離や高次高調波発生などの高強度場現象の解明、短波長レーザーの開発の推進に貢献した。近年では、ヘリウム原子（2 電子系）のダイナミクスの研究に国内外の多くの理論家が取り組み、高強度短波長レーザーの応用技術開発のための重要なツールになりつつある。

## 2. 本研究分野の現状と最近の進歩

高強度短波長レーザー光源の最初の応用としてヘリウム原子のイオン化の実験が行われるようになったのにあわせ、その過程の計算が本研究分野の中心的な課題となっている。光電場中のヘリウム原子の時間依存シュレーディンガー方程式は空間 6 次元（3 次元  $\times$  2 電子）であるが、極座標で考えると角度方向の 4 次元と半径方向の 2 次元に分解できる。このうち角度方向成分を結合球面調和関数で展開し、適切な基底関数の線形結合として表した半径方向成分の時間発展を計算するのが、主流の数値解法（一般に時間依存緊密結合法あるいは時間依存チャネル結合法と呼ばれる）となっている。基底関数としては、B スプライン関数あるいは空間グリッド上での直接展開が用いられることが多い。また、通常の座標ではなく、超球座標を用いた緊密結合計算も行われている。

ヘリウム原子のイオン化過程の中でも特に注目されているのが、2 光子超閾電離（必要以上の光子を吸収してイオン化する過程）および 2 光子 2 重電離（2 光子を吸収して 2 価のヘリウムイオンになる過程）で、1990 年代末から現在まで、Colgan ら、Nikolopoulos ら、Parker ら、Bachau ら、中嶋ら、石川らなど多数のグループがこれらの過程の断面積の値を得ている。また、光子エネルギーが 45eV 付近の軟エックス線の場合 2 価イオンよりも共鳴励起された 1 価イオンができ

る確率をはるかに大きいことや、光子エネルギーが 54.4eV (第2イオン化エネルギー) 以上の場合にはアト秒の超短パルスと長いパルスとでは光電子エネルギースペクトルが異なったものとなるなど、高強度・短波長・超短パルスの領域に特有な新しい現象も次々に予言されている。

近似や経験的方法を全く使わないので計算結果の精度と信頼性が高く、実験の定量的な指針となるのもこれらの理論研究の大きな強みである。最近、渡部らおよび緑川らのグループが相次いでヘリウムの超閾電離や2光子2重電離[2]の観測に成功し、短波長領域での非線形光学効果の観測・応用は日本が世界をリードしているが、その成功には本研究分野の最新の理論計算の支援(特に中嶋らと石川ら[2]によるもの)が一役買っている。

2003年頃からは、Colganらのグループによって、時間依存緊密結合法をリチウム原子(3電子系)の1光子電離の計算に応用する試みも始められている。彼らは2重電離の断面積を求め、実験値と良好な一致を得ている。

### 3. 本研究分野の将来性・応用

今後のレーザー技術の進歩にともない、時間依存シュレーディンガー方程式の直接解法に基づく原子ダイナミクス理論計算の重要性は高まるばかりである。

上述のColganらによるリチウムのイオン化の研究は低強度の光を対象としているが、高強度光中の3電子系のダイナミクス理論計算が可能になれば、生体分子イメージングにおいて考慮しないとイケないオージェ効果についての知見が得られるであろう。また、波形整形技術の目覚ましい進歩を踏まえ、複雑な波形や時間に依存する偏光を持った光パルスの場合へと研究が進展すれば、原子・分子ダイナミクス制御および化学反応制御技術の礎となる理論が構築されるであろう。さらに、将来の短波長光技術の応用の多くが分子を対象としていることから、理論計算の分野も、必然的に、原子から分子ダイナミクスの研究へと進展していくことであろう。

本分野のこれまでの研究、近い将来の応用は、いずれも光を振動電場として取り扱っている。しかしながら、電磁場を量子化して光子の概念に基づいた理論計算も原理的には可能と考えられる。いつの日か、そのような究極の高強度短波長レーザー光中の原子ダイナミクス理論が構築されるであろう。

### 4. 参考文献

1. Uwe Becker and David A. Shirley, VUV and Soft X-Ray Photoionization, Springer (1996)
2. H. Hasegawa, E. J. Takahashi, Y. Nabekawa, K. L. Ishikawa, and K. Midorikawa, Phys. Rev. A, 71, 023407 (2005)