励起ヘリウム原子の内殻電離のアト秒ダイナミクス

石川顕一¹, Suren Sukiasyan², Misha Ivanov^{2,3}

1) 東京大学 大学院工学系研究科 附属光量子科学研究センター

2) Imperial College

3) Max Born Institute

光やX線による原子のイオン化や量子状態間の遷移は、これまで一瞬のできごととしてとらえら れてきたが、高次高調波アト秒レーザーの出現で、電子が出てくるまでの過程を追跡できるよう になってきた[1,2]。本研究では、アト秒極端紫外(XUV)光パルスによる励起ヘリウム原子の1光 子電離における、電子相関アト秒ダイナミクスを、1次元および3次元の時間依存シュレーディ ンガー方程式(TDSE)シミュレーション[3]によって研究した。励起ヘリウム原子を考えるのは、 より多くの電子を含む原子における内殻電離を模擬するためである。

電子相関に着目している本研究では、レーザー場 *E*(*t*)中のヘリウム原子に対する時間依存シュレーディンガー方程式(原子単位で書いている)

 $i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,t) = \left[-\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + (z_1 + z_2)E(t)\right]\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,t)$

を時間依存緊密結合法で厳密に解く。我々はこれまでにそのための計算コードを開発し、多くの 業績をあげ[3,4]、実験との良好な一致を得ている[5,6]。

光子エネルギー72.9 eV の5 サイクルパルスによる 1*s2p¹P* 励起状態の1光子電離でできるヘリ ウムイオンの、各準位のポピュレーションの時間変化を図1に示す(3 次元 TDSE 計算の結果)[7]。 イオン化のほとんどは、1*s* 電子(内殻電子)による光子吸収で始まる。図1を見ると、いくつか の時間スケールがあることが分かる。まず、200 アト秒までは 2*p* と 3*p* 状態が同程度できる。こ れは内殻電子が突然になくなったことによる瞬間的なポテンシャル変化の効果、すなわちシェイ クアップである。それ以降は、パルスは終わっているため結果はゲージに依存せず、またダイナ ミクスは純粋に電子相関によるものである。200~400 アト秒では準位間のポピュレーション移動 が起こる。具体的には、2*p* と 3*p* 状態のポピュレーションが減り、2*s*, 3*d*, 4*f* といたシェイクアッ プでは励起されることのない準位のポピュレーションが増えている。

これは、「内側から出ていく電子」が「イオンに残る電子」に衝突することで量子状態遷移を 誘起しているためで、我々はこれを「ノックアップ」と名付けた[7]。400 アト秒以降のダイナミ クスは自動電離によるものであると考えられる。計算結果を解析したところ、エネルギーの高い (半径の大きい)状態へのノックアップほど時間的に後に起こることや、電子間クーロン相互作 用による遷移行列要素がエネルギーの高い状態間のものほど時間的に後でピークを迎えること を見出した。これはノックアップ描像を支持している。また、このことは、内殻電子が外へ出て いく過程で、ノックアップによる量子状態の変化がカスケード的に起こっていることを示してお り、光電離の時間遅延[1]にも寄与している可能性がある。

今後は、ノックアップ現象の効果を実験的に検証するポンプ・プローブスキームについて、研 究を進めていく予定である。



図1 光子エネルギー72.9 eV の5 サイクルパルスによる 1*s2p¹P* 励起状態の1光子電離でできるヘリウム イオンの、各準位のポピュレーションの時間変化

[1] M. Schultze et al., Science 328, 1658 (2010).

[2] K. T. Kim, D. H. Ko, J. Park, N. N. Choi, C. M. Kim, K. L. Ishikawa, J. Lee, and C. H. Nam, Phys. Rev. Lett. **108**, 093001 (2012).

[3] K. L. Ishikawa and K. Midorikawa, Phys. Rev. A 72, 013407 (2005).

[4] K. L. Ishikawa and K. Ueda, Phys. Rev. Lett. 108, 033003 (2012).

[5] R. Moshammer, Th. Pfeifer, A. Rudenko, Y. H. Jiang, L. Foucar, M. Kurka, K. U. Kühnel, C. D. Schröter, J. Ullrich, O. Herrwerth, M. F. Kling, X.-J. Liu, K. Motomura, H. Fukuzawa, A. Yamada, K. Ueda, K. L. Ishikawa, K. Nagaya, H. Iwayama, A. Sugihara, Y. Mizoguchi, S. Yase, M. Yao, N. Saito, A. Belkacem, M. Nagasono, A. Higashiya, M. Yabashi, T. Ishikawa, H. Ohashi, H. Kimura, and T. Togashi, Opt. Express 19, 21698 (2011).

[6] R. Ma, K. Motomura, K. L. Ishikawa, et al., arXiv:1204.4812v2 [physics.atom-ph] (2012).

[7] S. Sukiasyan, K. L. Ishikawa, and M. Ivanov, Phys. Rev. A 86, 033423 (2012).