

液相のアト秒光イオン化遅延時間測定及び理論開発

京都大学 理学研究科・理学部 化学専攻 物理化学講座 田村 嘉章

研究成果概要

光イオン化過程における光電子のアト秒時間ダイナミクスの情報である光イオン化遅延時間は、主に分子ポテンシャルとの散乱に起因する光電子波動関数の位相シフトを反映しており、測定値の解析のためは光電子の連続状態の数値計算を行う必要がある。気相において励起された光電子は、分子の近距離ポテンシャルとの散乱後、正電荷ホールによる長距離 **Coulomb** ポテンシャルと相互作用する。気相ではこの **Coulomb** ポテンシャルとの相互作用が光電子放出遅延時間に大きく寄与する。一方で、液相においては光励起の後に溶媒和分子の電荷密度の非平衡緩和過程が起き、**Coulomb** ポテンシャルが気相のものとは異なる。その為、液相の光イオン化遅延時間測定には、電荷密度の詳細な情報が必要となる。

本研究では、10~20eV 程度の光電子に対する液相(水・アルコール)の電子放出遅延時間測定の解析を目的として、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、孤立気相水分子および溶媒和された水分子クラスターの **Gaussian** による電荷密度の量子化学計算を行った。その結果は、ポアソン方程式より静電ポテンシャルに変換され、光電子の散乱状態の計算に使用された。