

1B1a

強レーザーパルスによって生成する超多価フラーレンカチオンの振動・解離過程

— 第一原理分子動力学によるシミュレーション —

(東北大院理、核融合科学研*) ○中井克典、新津直幸、河野裕彦、藤村勇一、田中基彦*

nakai@mail.tains.tohoku.ac.jp

非常に強いレーザー光と物質の相互作用は新しい反応や非線型現象を引き起こすまでに至っている。例えば、約 800 nm のチタンサファイアレーザーを C_{60} に照射する場合は炭素が 2 つずつ外れたフラグメントが観測されることが知られている[1]。一方、 C_{60} の分子線がパルス長 $\tau = 70$ fs、波長 $\lambda = 1800$ nm、ピーク光強度 $I =$ 約 10^{15} W/cm² の高強度近赤外レーザー光と相互作用する場合、ほとんど解離することなく +12 価までの超多価親カチオン C_{60} を生成できることが Bharadwaj らによって報告されている[2]。このような現象が C_{60} のみならず他のフラーレン(C_{20} 、 C_{70} 等) においても見られるかどうかは興味深い。

本研究ではレーザー電場を時間依存断熱状態として取り込んだ第一原理分子動力学法を用いることにより超多価フラーレンカチオンで誘起される振動ならびに解離について調べた。

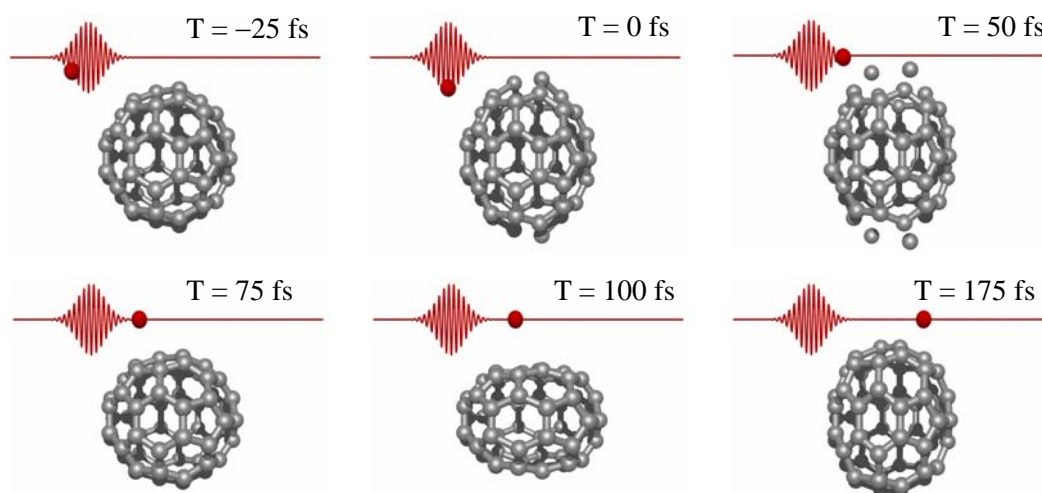


図 レーザーパルス ($\tau = 70$ fs, $\lambda = 1800$ nm, $I = 0.7 \times 10^{15}$ W/cm²) による C_{60} の運動の時間依存断熱状態法を取り込んだ第一原理分子動力学法により求めたスナップショット。

C_{60} ではレーザー電場により電場の偏光方向に引き伸ばされる $h_g(1)$ モードの振動が誘起され、振動モードに与えられたエネルギーは 20 eV 以上になるにもかかわらず、解離に至らなかった。誘起される $h_g(1)$ モード(周期は約 120 fs)はラマン活性の最低振動モードであり、ほぼパルス長(70fs)の 2 倍と一致している。よって衝撃 Raman 過程によって振動励起が起こっていると考えられる。またパルス長 30fs に変えたところ、 $h_g(1)$ モードの励起が抑制されるとともに、 $a_g(1)$ モードの励起も同時に起こっていることも見られた。一方、静的には安定構造を持つ C_{20}^{12+} を C_{20} の垂直励起によって生成した場合、300fs 程度で C_{16}^{4+} と $4C^{2+}$ への解離がみられた。本発表では他の条件における計算結果とともに振動・解離機構について議論を行う。

[1] E. E. B. Campbell, K. Hoffmann, H. Rotke, and I. V. Hertel, J. Chem. Phys. 114 (2001) 1716.

[2] V. R. Bhardwaj, P. B. Corkum, and D.M. Rayner, Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 043001.