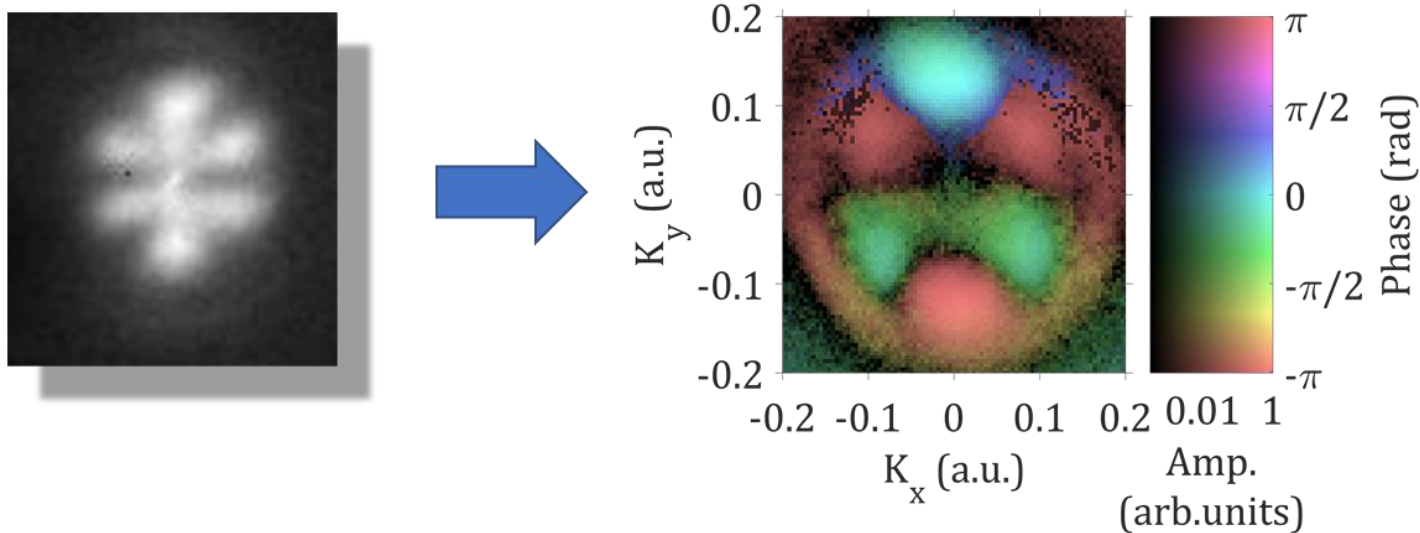


電子のひみつ

2022改訂版

～複素数の電子波動関数のイメージング～



電子の密度分布だけではなく、電子の「**位相**の違い」を測定
複素数の波動関数を可視化。

早稲田大学 先進理工学部
応用物理学科 新倉弘倫

Hiromichi Niikura
niikura@waseda.jp

Science 356, 1150 (2017)
Phys.Rev. A106, 063513(2022)

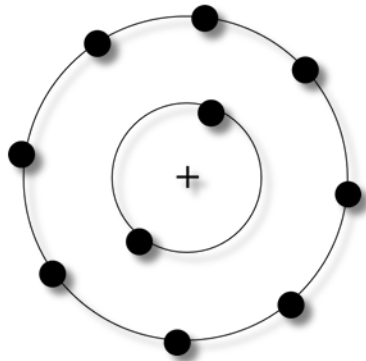
Special thanks to Dr. D.M. Villeneuve at National Research Council of Canada.

電子の表し方

原子・分子・固体（物質）の中に電子はある。

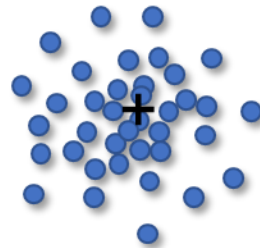
Schrödinger (1925)

ボーアモデル(1913)



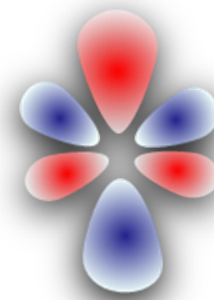
原子核のまわりを
電子がぐるぐる回る

電子雲

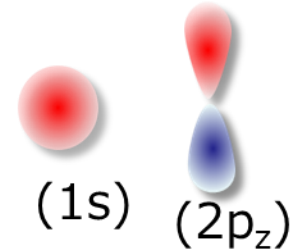


電子が「確率的に分布」

波動関数 Ψ によるモデル



f-orbital
($m=0$)



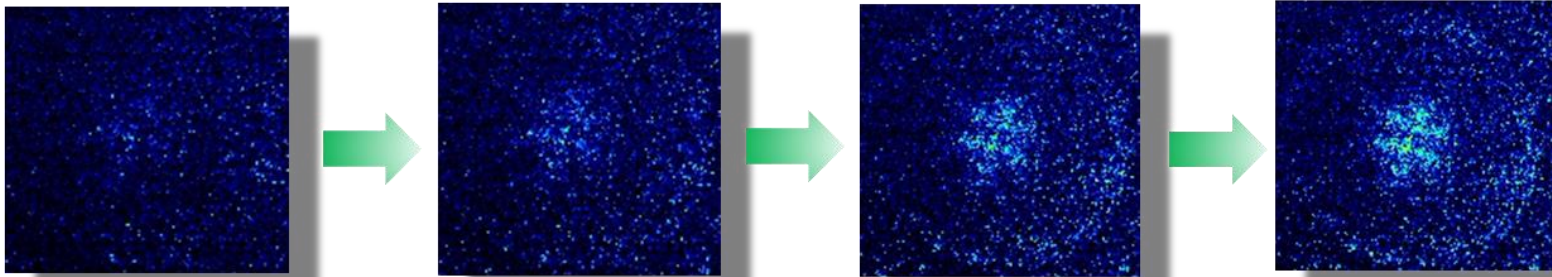
(1s)

(2p_z)

電子は確率的に分布
+ “位相（符号）” が異なる

- 惑星のように、原子核の周りを回っているというモデルではなく、
- 電子は「確率的に分布」している。
- その確率分布には「形」があり、さらに「色（位相）」によって区別される。

アト秒レーザーで電子(波動関数)を測定する

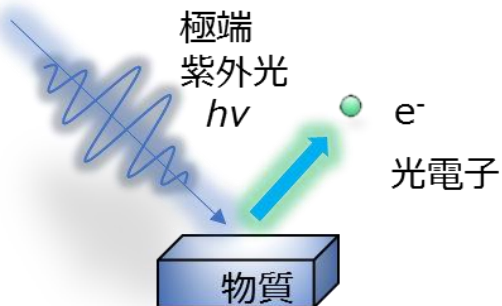


レーザーが当たると、電子が放出され、検出器のどこかに**粒**となって観測される。それを多数回繰り返すと、**電子の分布 (波動関数の自乗 $|\Psi|^2$)**が見えてくる。

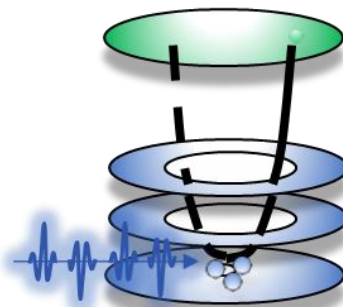
Max Born の確率解釈(1926) :

波動関数の自乗 $|\Psi|^2$ は電子が存在する**確率**を表す。

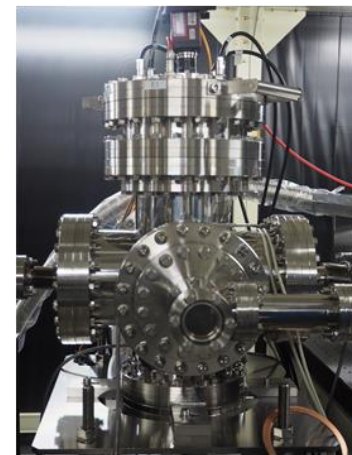
※動画は検索すると「JST日本未来館」のサイトにあります。



物質に波長の短い光を当てると電子が放出される。(光電効果)



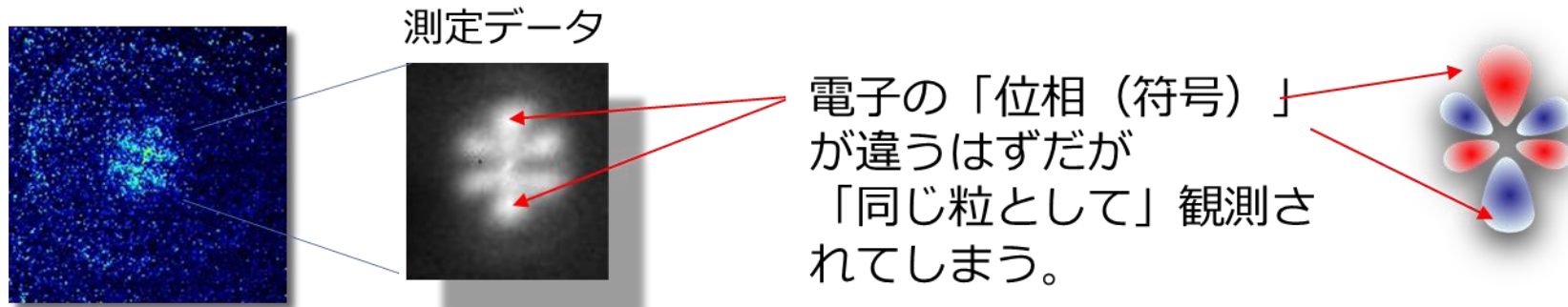
電子がどの方向に、
どんなエネルギーで
飛び出るかを検出。



Science 356, 1150 (2017)

しかし！ 電子の波としての情報（位相）は、検出器に当たると消えてしまう。

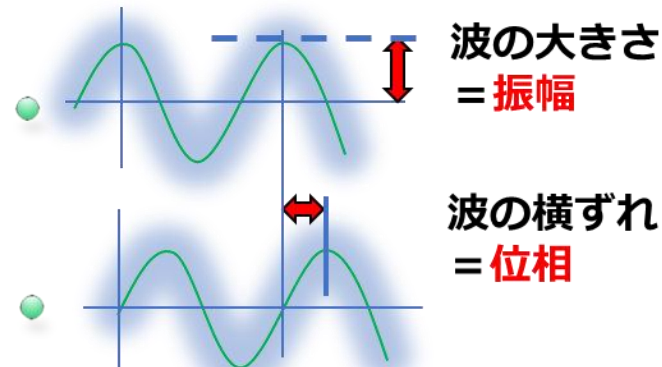
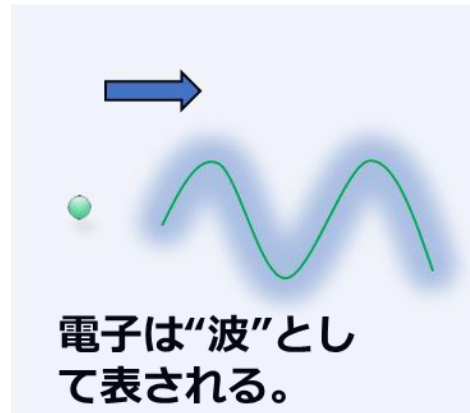
（広い意味でのコペンハーゲン解釈による波動関数の収縮）



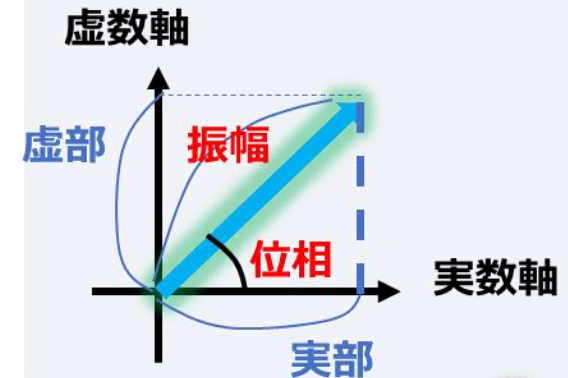
**波動関数の自乗（分布） $|\Psi|^2$ であって
複素数の波動関数そのもの Ψ は測定されない。**

電子の**波**としての性質

波の振幅と位相



複素数表示

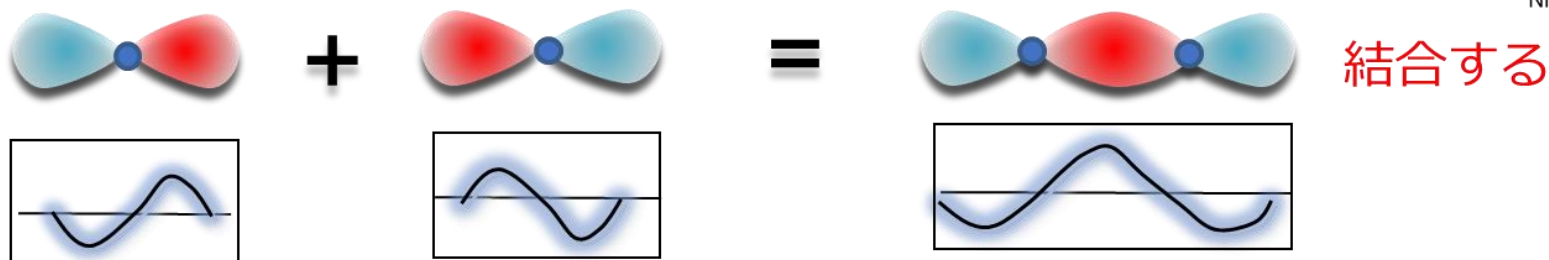


振幅と位相、または実部と虚部の2つのパラメーターが必要。

そこで、アト秒レーザーによる「電子の位相分布測定」が必要。

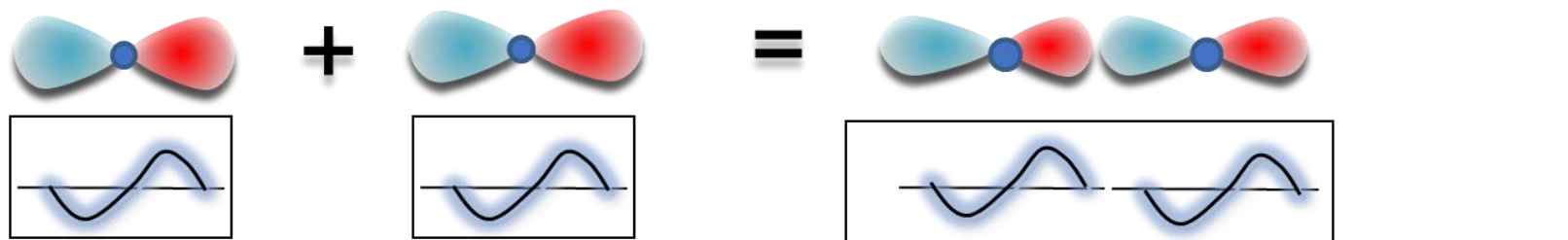
化学反応における電子の位相（複素数）の重要性

(a) 同じ位相



波の出っ張っている部分同士が**強め合う**

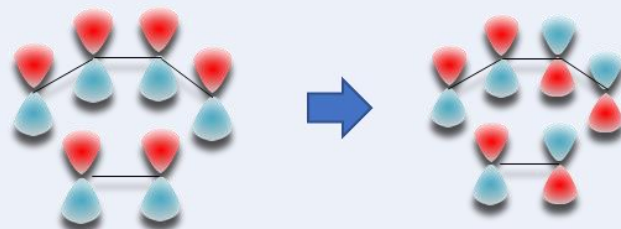
(b) 違う位相



波の出っ張っている部分とへこんでいる部分が**打ち消し合う**

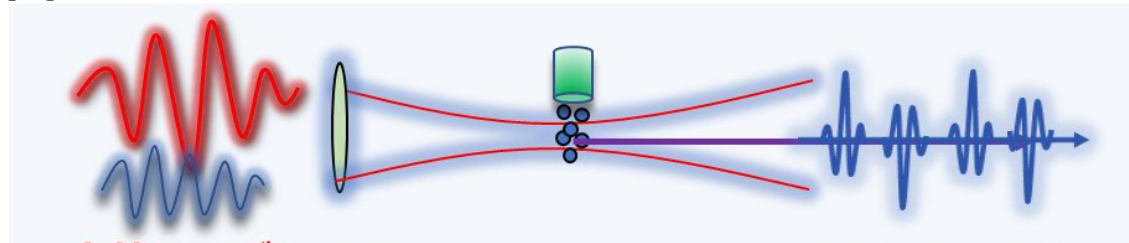
化学反応の理解には「電荷分布」だけではなく「**複素数の波動関数（位相情報）**」が必要。

ウッドワード・ホフマン則
フロンティア軌道理論
(福井謙一博士：ノーベル化学賞1981)



アト秒レーザーパルスの発生と測定

(a) アト秒パルス発生



赤外レーザー(IR)
($\sim 790\text{nm} = 1.57\text{eV}$)

2倍波

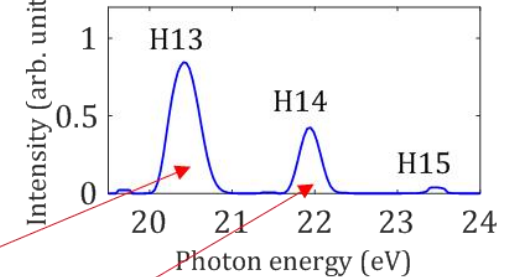
($\sim 395\text{nm} = 3.14\text{ eV}$)

ガスに
集光

極端紫外領域
アト秒パルス発生

スペクトル

複数の色 (波長・エネルギー)

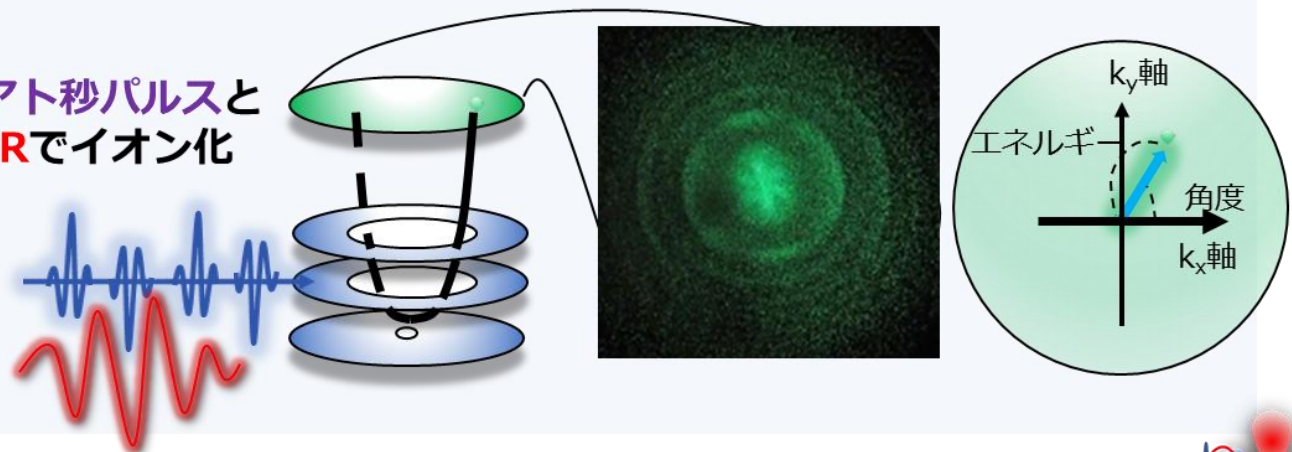


第13次高調波(H13): 790 nm の $1/13$ の波長($\sim 61\text{ nm}$)

第14次高調波(H14): 790 nm の $1/14$ の波長($\sim 56\text{ nm}$)

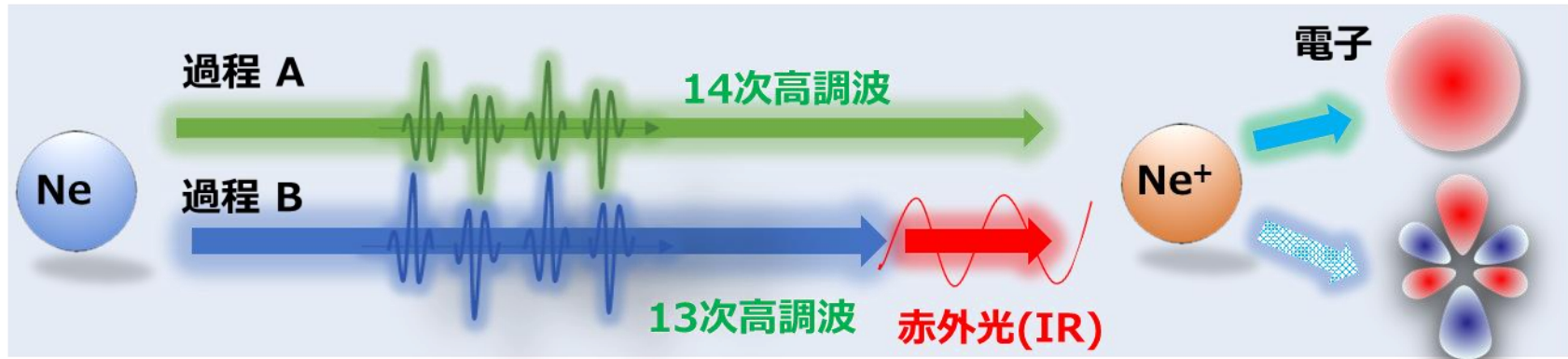
(b) Velocity map imaging による光電子運動量分布の測定

アト秒パルスと
IRでイオン化

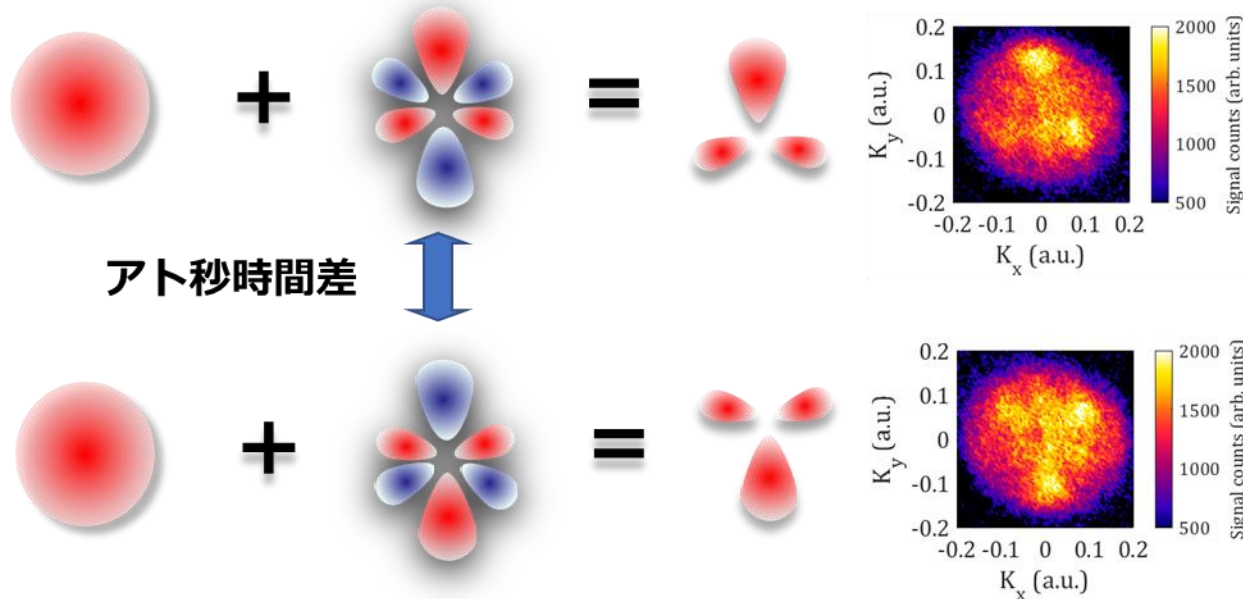


電子は、ある方向に、あるエネルギーで飛び出す。
2次元の運動量(k_x, k_y)分布として測定される。

アト秒レーザーを用いた電子波動関数の位相測定

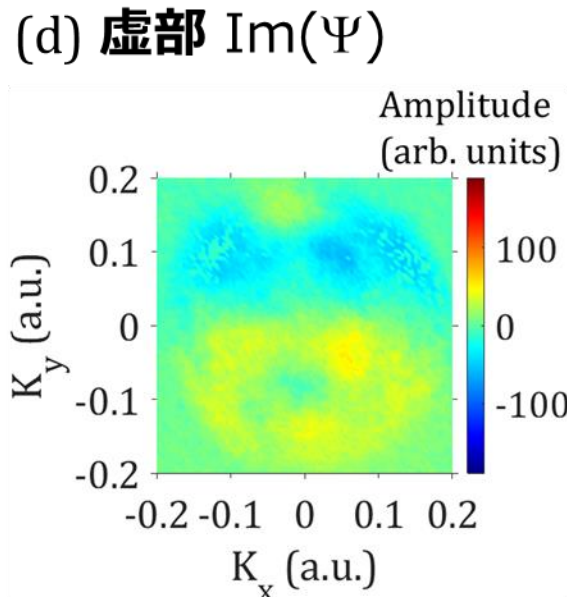
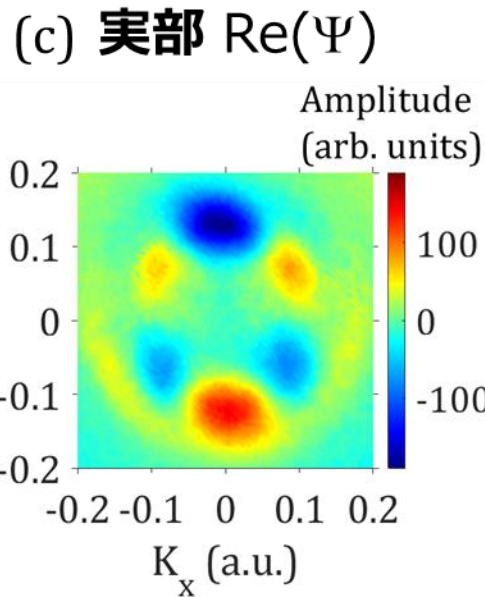
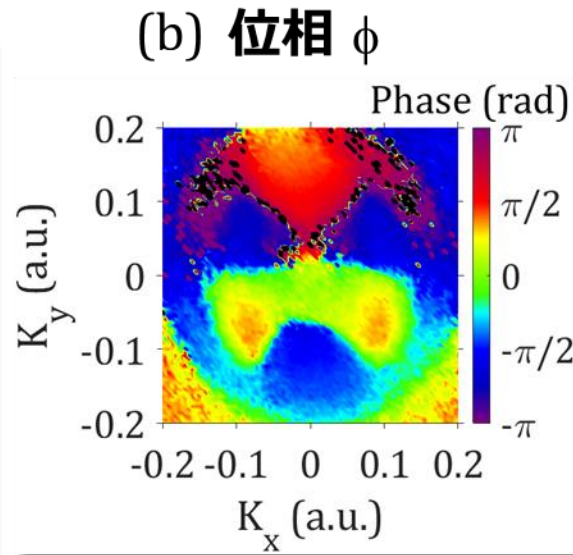
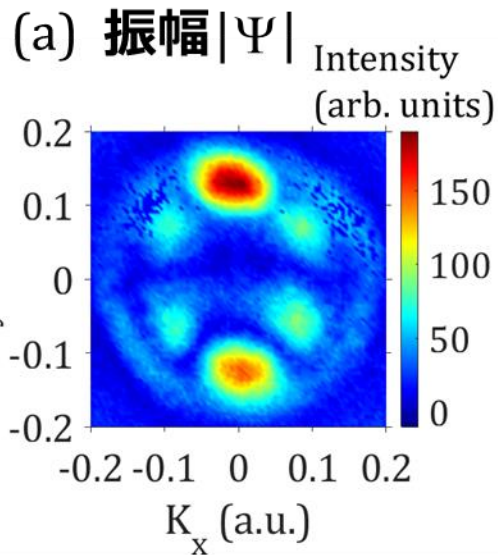


1. イオン化に2通り目のパス(14次高調波：過程A)を加える。
2. 過程A のみのとき , 過程 Bのみのとき  が生成。
3. 過程Aと過程Bの両方を通る可能性があるとき：ふたつの重ね合わせが生成。位相が抽出。



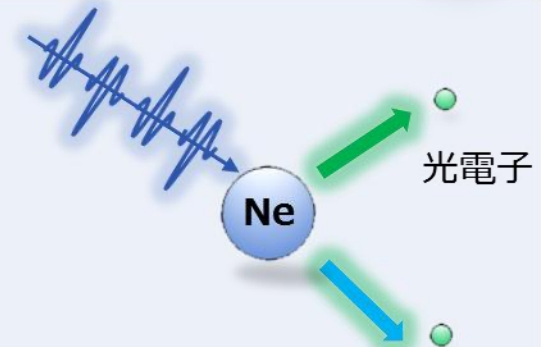
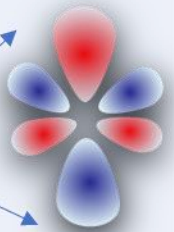
電子の“粒”
ごとに
位相と
振幅を
測定。

複素数の波動関数の可視化



赤色と青色で
位相が π 異なる。

位相の違い
を可視化。

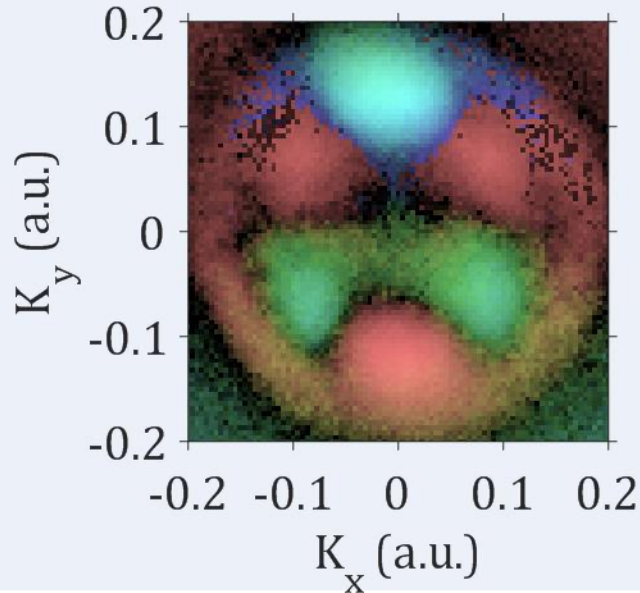


異なる方向・エネルギー(運動量: k_x, k_y)で放出された電子の位相差を測定。

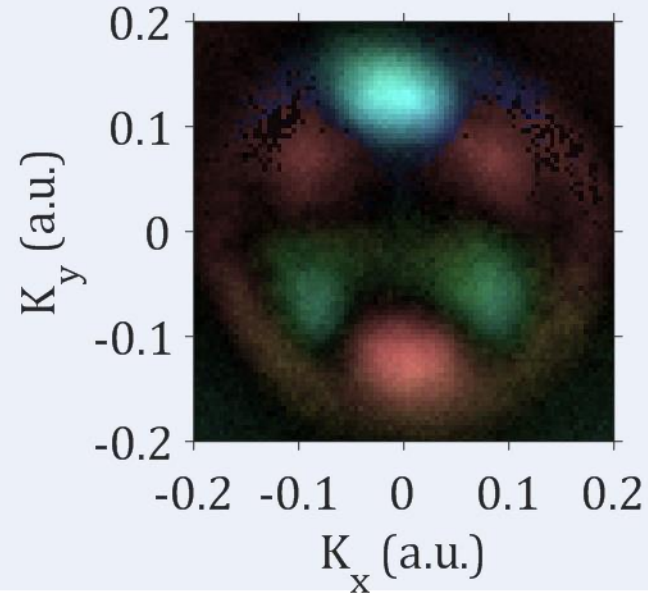
実部・虚部表示:
プラスとマイナスの振幅
をとっている。

a.u. : atomic unit

複素数の波動関数 (HSV表示)



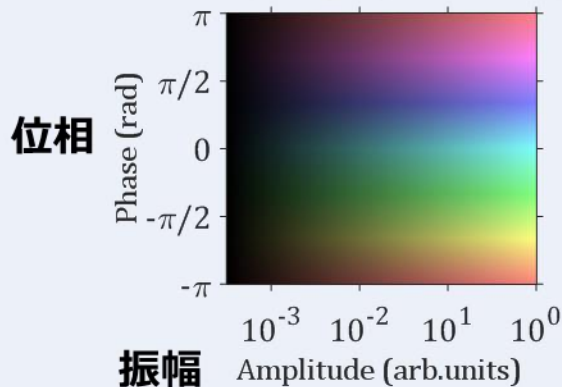
対数スケール



リニアスケール

位相分布と振幅分布を一枚の図で表す。

HSV 表示 ・ ・ hue, saturation, value 3次元の色空間

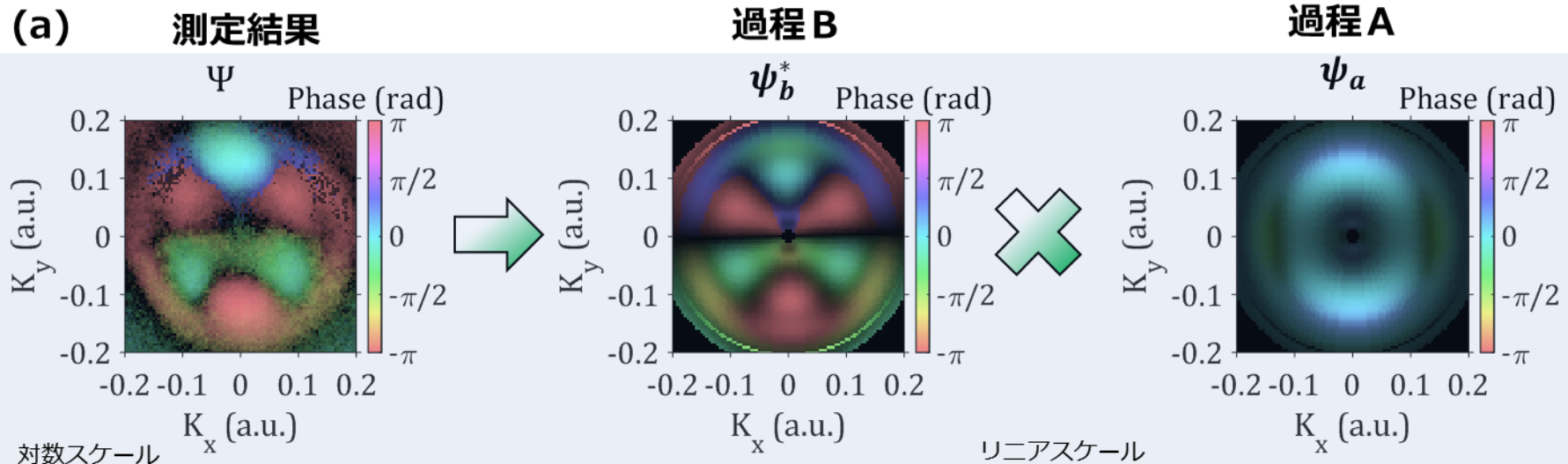


位相(phase) ・ ・ ・ 色(color), hue

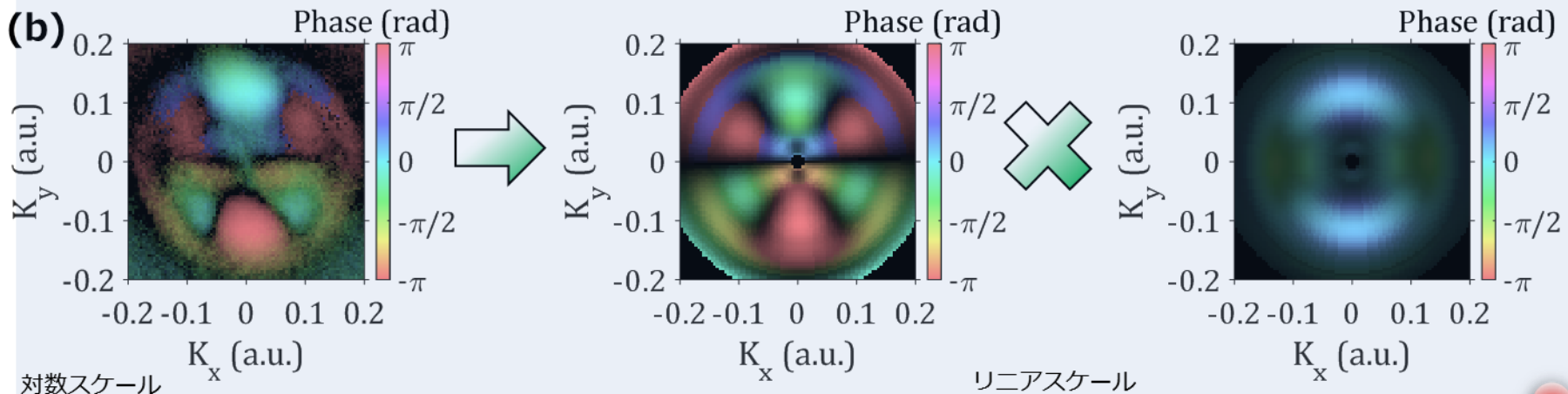
振幅(amplitude) ・ ・ ・ 明るさ, value

saturation=0.5 に設定。

それぞれのイオン化過程によって生成した波動関数も可視化。



実験条件（アト秒パルスの波長）を変えると、位相分布が変化する。



$$\Psi = \psi_b^* \psi_a$$

高分解能で波動関数の位相の違いが可視化。
主に過程Bで(a)と(b)の違いが生じたことがわかる。

まとめ

電子は波としての性質をもつ。
波を表すために「位相」「振幅」の2つの物理量が必要。
あわせて「複素数」となる。「複素数の波動関数」で電子の状態を表現。

極端紫外光を原子などに照射すると、電子が放出される。
光電子分光法：放出された電子の運動エネルギーや角度を測定する方法。

電子は検出器に当たると、粒として観測される。
(ある条件で) 粒をたくさん集めると波動関数の「自乗」 $|\Psi|^2$ の姿が見えてくる。
しかし、検出器にあったときに、「位相成分」は消えてしまう。
(複素数の波動関数 Ψ はそのままでは検出されない)。

アト秒レーザーを用いて、電子波動関数の干渉を用いて、位相分布も測定。
振幅と位相分布の両方から、複素数の波動関数を可視化。
干渉する前の2つの過程で生じた波動関数に分けて可視化。

干渉を用いているため、アト秒レーザーのバンド幅よりも高分解能で測定が可能。

「位相分布」測定により、光電子分光法や、化学反応の理解に新たな進展。
今後は様々な試料に適用することを計画。時空間での顕微測定も。

概要



問題：

20世紀初頭の量子力学：

電子は**粒**としての性質と、**波**としての性質を持つ。
(電子の粒子性と波動性、**duality**)

電子を粒とすると、原子内の電子の様子などが説明できない。
波とすると、うまく説明できる。

波として表す：**位相**と**振幅**、**複素数の波動関数**

しかし、従来の光電子分光法などでは、「**電子は粒として**」**観測**されるため
波としての性質（複素数の波動関数）を測定することは**困難**。

アト秒科学：

21世紀年頃から発展。**電子の運動**を測定可能。

極端紫外領域のレーザーパルス(**高次高調波**：High-harmonics)

再衝突電子 (attosecond re-colliding electron)

本研究では：

アト秒レーザーパルスの**発生を制御**し、**干渉**を用いることで

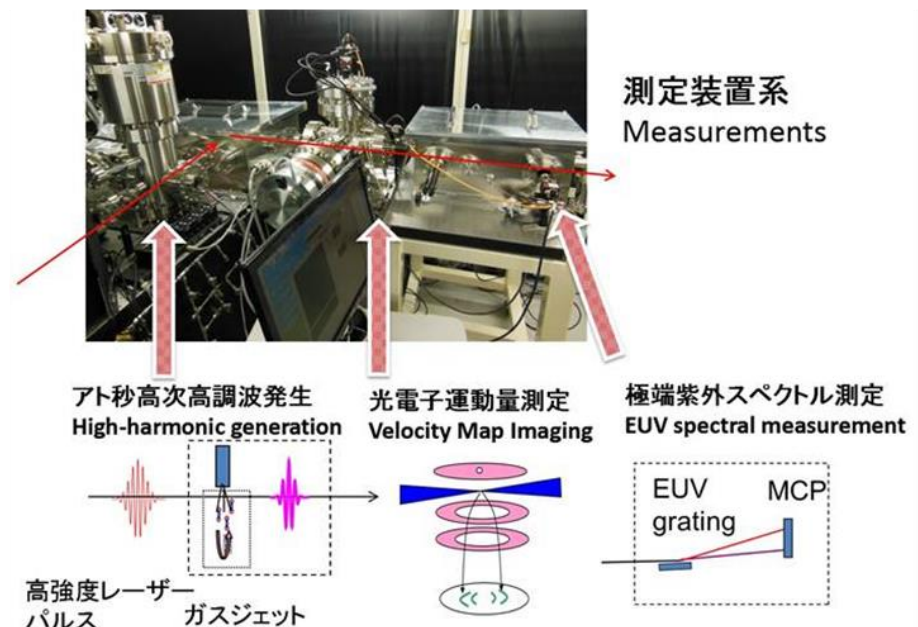
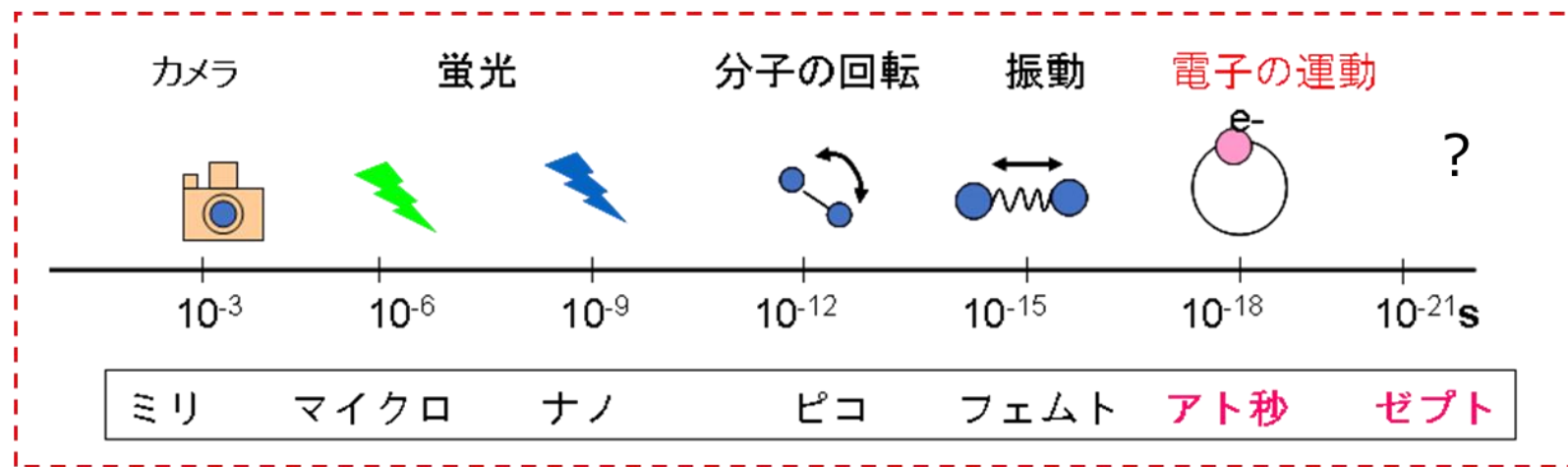
電子の運動量ごと（どの方向にどのようなエネルギーで飛び出したか）ごとの
位相を測定。**位相分布**と**振幅の分布**から、**複素数の波動関数**を高分解能で**可視化**。

発展：

電子の**位相分布**という新たな測定により、光電子分光法などに新規な展開。

物質の**波としての性質**（量子な性質）をもとにした新規な**物質開発・化学反応解明**。

アト秒科学 (Attosecond Science) ・ ・ ・ 電子の姿を見る



- ・ **アト秒科学**・・・電子の姿とその変化を見る。
- ・ 2000年ころからアト秒科学が進展。物質科学の基盤。
- ・ アト秒レーザーパルス（高次高調波）、アト秒再衝突電子
- ・ 再衝突電子を用いた方法で、アト秒精度での測定や分子軌道イメージング。
- ・ **アト秒レーザーパルス**で、**複素数の電子**波動関数を可視化。

“Sub-laser-cycle electron pulses for probing molecular dynamics”

H. Niikura, F. Legare, R. Hasbani, M. Ivanov, A. D. Bandrauk, D. M. Villeneuve and P. B. Corkum, **Nature** **417**, 917-922(2002).

“Probing molecular dynamics with attosecond resolution using correlated wave packet pairs”, H. Niikura, F. Legare, R. Hasbani, M. Ivanov, D. M. Villeneuve and P. B. Corkum, **Nature** **421**, 826-829 (2003).

“Tomographic Imaging of Molecular Orbitals”, J. Itatani, J. Levesque, D. Zeidler, H. Niikura, H. Pepin, J. C. Kieffer, P. B. Corkum and D. M. Villeneuve, **Nature** **432**, 867-871 (2004).

“Coherent imaging of an attosecond electron wave packet”, D.M.Villeneuve, P. Hockett, M.J.J.Vrakking and H. Niikura, **Science** **356**, 1150 (2017)

“High-resolution attosecond imaging of an atomic electron wave function in momentum space”, T. Nakajima, T. Shinoda, D. M. Villeneuve and H. Niikura, **Phys.Rev. A** **106**, 063513(2022).

**“From Femto
to Atto Clock”**

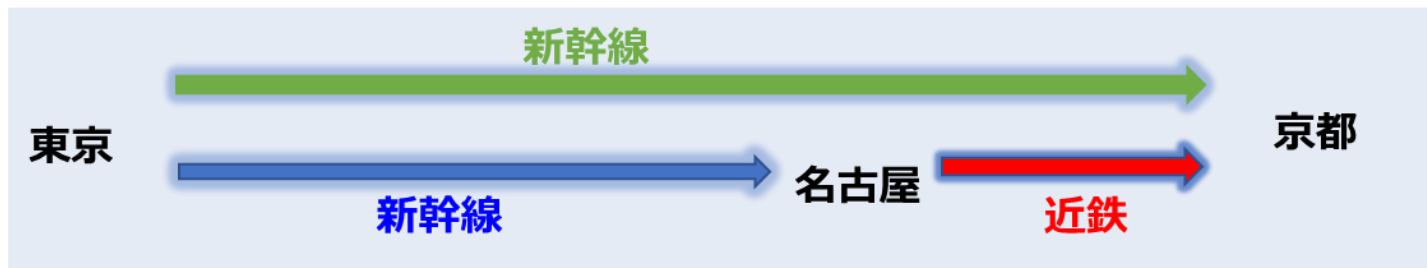


カナダ国立研究機構（**National Research Council of Canada**）の
P. Corkum研で「アト秒に到達した」記念にもらったもの。1つしかない。
（新倉研究室に飾ってあります）。

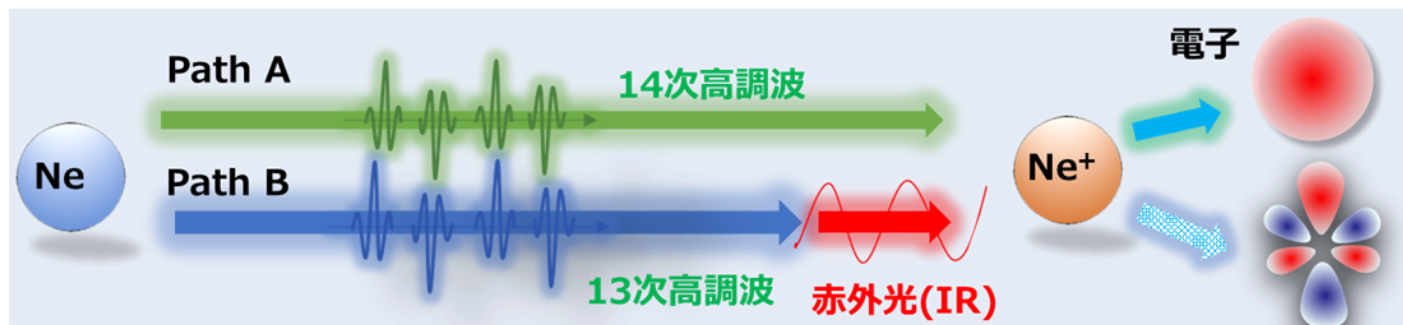
補足

2つの“過程の干渉”

古典的：京都までは2通りの行き方（パス）がある。 どちらのパスを通ったかは**わかる**。

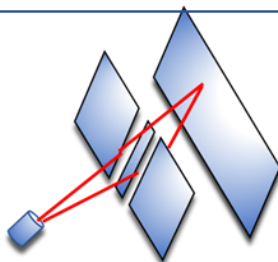


量子的：イオン化には2通りの行き方（パス）がある。 どちらのパスを通ったかは**わからない**。



- 1つの電子が、2通りのパスでイオン化する**可能性**がある。
このとき、干渉した結果が出現。
1つのアト秒パルスは、2つ（以上）の高調波（異なる波長の光）を含む。
- ✕ 「2つのアト秒パルスが、2つの電子を作って、それが干渉する」**ではない**。

「**2重スリット実験**」と同様。



※大和八木での乗り換えは気にしない。