

テラヘルツ波による同位体分離の高効率化に関する数値計算

(原子力機構) ○横山啓一, 橋本雅史, 松岡雷士, 笠嶋辰也

【序】 極短パルスレーザーの波形整形によるコヒーレント量子制御の応用として、レーザー同位体分離の研究が原子力機構において進められている。我々は、二原子分子の回転準位におけるカスケード励起により同位体選択性の飛躍的増強が可能であることを近年提案した[1、2]。分子の赤外多光子解離を利用する従来のレーザー同位体分離法では、高温あるいは重元素を含む分子においては振動回転スペクトルの熱広がり同位体シフトよりも格段に大きくなるため、実質的に分離不可能になる。我々が提案した新しい方法では、片方の分子についてのみ、分布全体を熱分布幅以上に移動させることにより、極低温に冷却せずに分離を可能にする。本研究では、これまでより現実的な電場波形、パルスエネルギーを用いると共に回転準位の遠心力歪みを考慮に入れた数値計算を行い、位相相関テラヘルツパルス列を照射したときの塩化リチウム分子の回転ダイナミクスを予想した。また、分布移動後に赤外多光子解離を100%の効率で起こすことが出来ると仮定して、分離係数及び分解確率に与えるテラヘルツ波照射の効果を検証した。

【計算】 回転ダイナミクスは3重対角行列をハミルトニアンとして持つ時間依存の緊密結合シュレディンガー方程式を4次のルンゲクッタ法を用いて数値的に解くことにより計算した。初期状態は単一の J, M に局在化した状態 $|J_0 M\rangle$ とした。分子集団の回転ダイナミクスを計算するために、熱分布(70K)に含まれる全ての J_0, M の組み合わせを初期状態とする計算を行い、ボルツマン因子を重みとして照射パルス数毎に、各 J のポピュレーションを足し合わせた。 ${}^7\text{Li}^{37}\text{Cl}$ と ${}^7\text{Li}^{35}\text{Cl}$ について計算を行った。電場は、 LiNbO_3 結晶中の光整流により発生するテラヘルツパルスの典型的なスペクトルを再現するフーリエ限界パルス電場(0.5THz 中心)を用意した。電場強度はパルスエネルギーが $25 \mu\text{J}$ となるように設定した。現在報告されている最大値は $30 \mu\text{J}$ であり、今回の設定は十分実現可能な値である。このパルス電場をビームスプリッターにより16個に分割し、 $\tau = 1/1.982B^{(37)}$ の遅延時間で配置したと想定して位相相関パルス列の電場を作成した。

【結果】 ポピュレーション分布の時間発展は図1のようになり、 ${}^7\text{Li}^{37}\text{Cl}$ では大きく分布移動が起こるのに対して、 ${}^7\text{Li}^{35}\text{Cl}$ ではほぼ完全に動かないことが分かる。この結果は、現在得られているテラヘルツ波でも同位体選択的分布移動の原理実証が可能なことを示している。なお、上述した τ の値は、 ${}^7\text{Li}^{37}\text{Cl}$ の分布移動が最大になるように選んでいる。 $1/2B^{(37)}$ からのずれは遠心力歪みを補償するために必要となっている。同位体選択的分布移動を実際の同位体分離に結びつけるために、分布移動後に同位体選択的な光分解やイオン化、光反応を起こす必要がある。ここでは赤外多光子解離を後続反応として想定する。中赤外領域の

振動回転スペクトルに現れる分布移動の効果を模擬すると図2のようになり、P 枝の主要部分がテラヘルツ波照射により波数軸上で分離することがわかる。分離係数及び分解確率を定量的に評価するために、ある波数以下のスペクトル成分はすべて解離すると仮定する。これは広帯域高出力中赤外レーザーにより実現する可能性がある。結果として、分離係数はテラヘルツ波パルス列の照射により3桁以上の増大が予想された。また、その時の分解確率は3割程度となり、実際の赤外多光子解離の効率が100%よりは低くなることを考慮しても、飛躍的な向上が期待できるという結果となった。

【結論】 現時点でのテラヘルツ波発生技術でも、我々が考案した回転カスケード法による同位体分離の増強を実証する実験ができることが分かった。また、今後のテラヘルツ波発生技術の進歩によりさらなる飛躍が期待できる。放射性廃棄物の分離など重元素の分離では数100K の高温環境が予想され、高い J での遠心力歪みの補償が重要になる。そのための分散制御技術の開発も必要になる。

【参考文献】

- [1] L. Matsuoka, T. Kasajima, M. Hashimoto, K. Yokoyama, “Numerical Study on Quantum Walks Implemented on the Cascade Rotational Transitions in a Diatomic Molecule”, J. Korean Phys. Soc., in press.
- [2] K. Yokoyama, L. Matsuoka, T. Kasajima, M. Tsubouchi, A. Yokoyama, “Quantum control of molecular vibration and rotation toward the isotope separation”, Advances in Intense Laser Science & Photonics, J Lee et al. (Publishing House for Science and Technology, Hanoi, 2010) pp113-119.

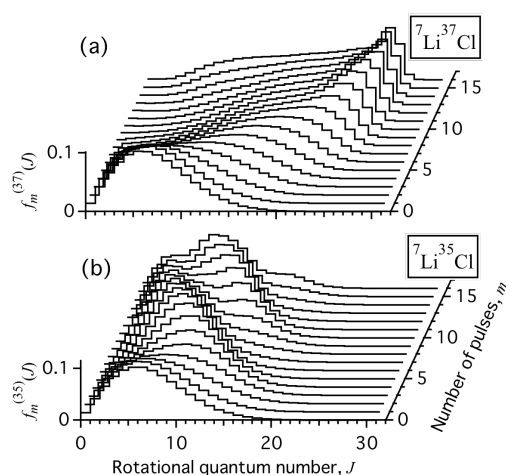


図1. ポピュレーション分布の時間発展: (a)7Li37Cl の場合。分布は大きく移動している。(b)7Li35Cl の場合。ほとんど分布は動かないことが分かる。

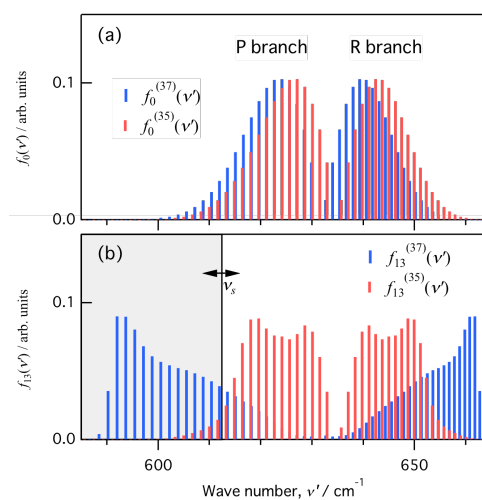


図2. 振動回転スペクトル: (a)テラヘルツパルス列照射前。2つの同位体分子で分布がほぼ重なっている。(b)13個のパルス列照射後。網掛けの波数領域が全て分解すると考えて分離係数を求めた。