

非平面キラル芳香分子(*P*)-2,2'-biphenol における光誘起 π 電子運動の量子スイッチ

(国立台湾大学¹, 国立交通大学², 東北大・理³) 峯尾 浩文¹, 八巻 昌弘², 寺西 慶哲², 林 倫年¹, 林 聖賢², 藤村 勇一³

Quantum switching of π -electron dynamics in optically induced nonplanar chiral aromatic molecule (*P*)-2,2'-biphenol

(Institute of Applied Mechanics, National Taiwan University, Taipei 106 Taiwan¹, Department of Applied Chemistry, Institute of Molecular Science and Center for Interdisciplinary Molecular Science, National Chiao-Tung University, Hsin-Chu 300 Taiwan², Department of Chemistry, Graduate School, Tohoku University, Sendai 980-8578³) Hirofumi Mineo¹, Masahiro Yamaki², Yoshiaki Teranisi², Michitoshi Hayashi¹, Sheng H. Lin², and Yuichi Fujimura³

[序] 芳香族分子の π 電子制御は、ナノエレクトロニクス・オプトエレクトロニクス領域において次世代の超高速スイッチングとして注目されている。これに関する量子化学研究については、Barth 等[1]はMgポルフィリンをUV円偏光短時間パルス励起したときに生成される π 電子環電流を計算している。この系では、電子回転は光の角運動量によっておこる。菅野等[2]は、ピラジン環をもつキラル分子の擬縮重状態を直線偏光UVパルスで励起することにより環電流を生成出来ることを示した。この場合、パルスは角運動量を持っていない。環電流は、2つの擬縮重電子状態によってつくられるコヒーレント状態が持つ角運動量によって生成される。いずれの分子も平面環状分子であり、生成される π 電子の角運動量は分子面に垂直(Z-軸)方向、その環電流ベクトルは一次元である。本研究では、二次元のスイッチングデバイスの可能性をもつ非平面分子(*P*)-2,2'-biphenol を取り上げ、UV直線偏光による π 電子回転のパルス制御法を構築することが目的である。ここでは、その概略を述べる。光誘起 π 電子動力学の詳しい理論的展開は次の講演で述べる。

[本論] 図1(a)は (*P*)-2,2'-biphenol の π 電子動力学を誘起する3つの電子状態(a, b1, b2) から、aとb1、及びb1とb2の

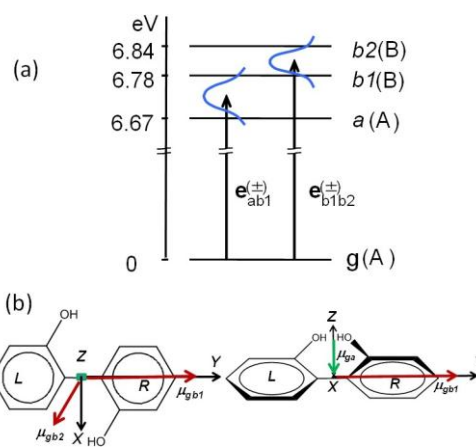


図1.

2つのコヒーレント状態が直線偏光パルスによってつくられることを示す。図1(b)は関係する遷移双光子モーメントを示す。 $e_{b1b2}^{(+)}$ はb1とb2の線形結合が同位相で励

起される、一方、 $e_{b1b2}^{(-)}$ は逆位相の線形結合が生成されることを示す。生成条件は既に報告している[2]。

図2は、直線偏光パルス励起により左と右 (L と R) フェノール環内の π 電子がお互いどのような相関をもって回転するかを示す[3]。L、R リング内の π 電子回転に対応する角運動量ベクトル(I_L , I_R)とそれらを合成したベクトル(I_x , I_z)も示されている。2つの芳香環の π 電子の位相を保った回転には4種類がある。CA-type 回転はL(R) 環では clockwise(anticlockwise)回転を示す。孤立系であるので π 電子が数回回転した後は逆回りの回転が起こる。2次元カレント制御を目的として、ポンプーダンプ型の量子制御法で得られた π 電子回転結果を図3に示す。ポンプパルスにより電子回転コヒーレンスが生成し、逆回転が起こる前にダンプパルスにより電励起状態を消去する。ここでは、CC→AC→AA→CAの段階的制御を取上げた。図3(a)は目的とする角運動量 I_z と I_x が数十フェムト秒内で得られたことがわかる。図3(b)には4段階の制御がそれぞれの段階でポンプとダンプパルスがどのように働いていたかをみるために、パルス形を図示した。ポンプとダンプパルスがお互い重なりあっている。これは、直線偏光のパルスが重なり円偏光的な性質をもち、電子の回転を加速させることを示している。

[結論] 非平面芳香環分子、(*P*)-2,2'-biphenol は二次元 π 電子カレントを生成する。ポンプーダンプ制御法によりカレントの量子スイッチできることが示された。分子振動効果や最適制御法による環電流・誘起磁場の制御・評価などは今後の課題である。

[参考文献] 1. I. Barth, J. Manz, Y. Shigeta, J. Am. Chem. Soc., 128, 7043(2006).

2. M. Kanno, H. Kono, Y. Fujimura, Angew. Chem. Int. Ed., 45, 7995(2006); M. Kanno, H. Kono, Y. Fujimura, S.H. Lin, Phys. Rev. Lett., 104, 108302 (2010).

3. H. Mineo et al., to be published.

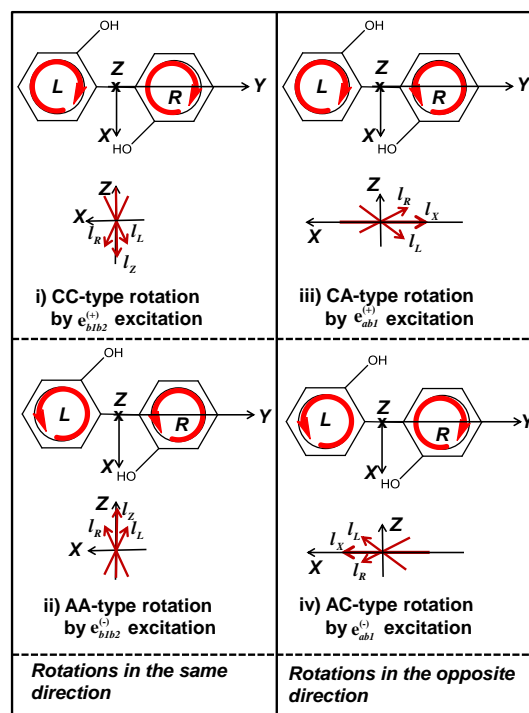


図2.

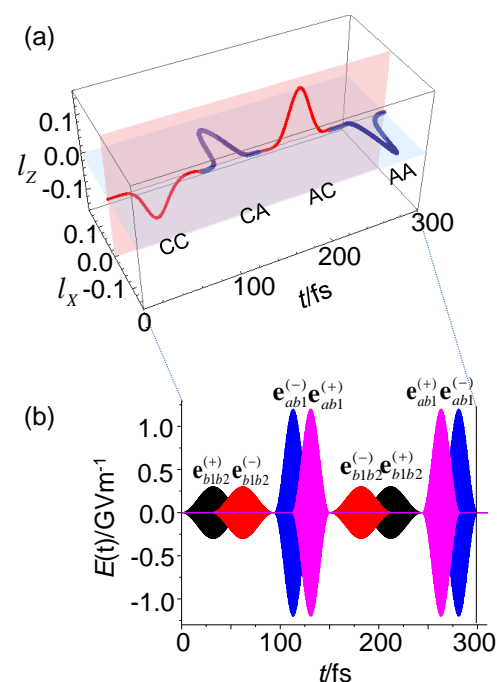


図3.