

テラヘルツパルス列による分子軸整列の数値計算

(原子力機構) ○坪内 雅明、熊田 高之

Simulation for molecular axis alignment by THz light pulse train

(JAEA) ○ Masaaki Tsubouchi, Takayuki Kumada

【序】分子が関わる衝突反応の観測を行った場合、通常は空間にランダム配向する分子集団からの実験室系での情報が得られる。しかし対象とする衝突反応は本来分子の相互配向に非常に敏感であり、分子軸固定系での観測が望まれる。そこで分子軸を空間に固定する試み、即ち「分子軸整列」の実現は、表面吸着分子の空間配向特性や、近赤外強レーザー場による軸整列などによりこれまで試みられて来た。しかしこれらは、表面や強レーザー場との相互作用により分子の電子状態が影響されてしまうため、電子状態に影響を与えない軸整列手法の開発が待たれている。

高強度テラヘルツ(THz)光を用いた手法はその有力な候補の一つである。THz 光は近赤外光に比べ周波数が二けた低く、電子状態に直接影響を与えない。そのため高強度 THz 光を照射しても軸整列以外の効果はほぼ現れないと考えられる。Nelson らは OCS 分子に高強度 THz 光を照射した場合、瞬間的に軸整列が実現されることを明らかにした[1]。さらに二連 THz パルスを用いた場合、干渉効果によりその軸整列がさらに促進されることを示した[2]。

本研究では、分子軸整列の更なる増強の実現のために高強度 THz 光パルス列を用いた手法を提案し、数値計算により検討した。また、THz 光パルス列を用いた分子軸整列実現に向けて行っている、実験的基盤技術開発についても報告する。

【計算手法】 分子と THz 電場間の双極子相互作用を考慮した時間依存 Schrödinger 方程式を数値的に解き、回転状態基底の波動関数の時間発展を計算した。回転波動関数から電場偏光方向に対する分子軸整列度 $\langle \cos^2\theta \rangle$ を計算し、分子軸整列における THz パルス列の効果を検討した。回転温度 8 K でランダムな方向に回転している OCS 分子を対象に計算を行った。

【結果】 図 1 に計算で用いた THz パルス列を示す。電場強度 50 kV/cm の THz 光を数パルスに分けてパルス列とする事を仮定しており、総パルスエネルギーは全ての計算で等しいとした。パルス列内のパルス間隔は、分子の回転再帰時間($t = 1/2B$: B [回転定数 Hz])と等しくした。図 2 に、THz パルス列照射により得られる分子軸整列の計算結果を示す。横軸は第一パルスが照射されてからの時間を、縦軸は分子軸整列の度合いを示す。縦軸の値が 2/3 の時、全ての分子が THz 光の偏光方向に配列し、0 の時完全にランダムに配向していることを示す。パルスが照射されるごとに軸整列が促進されており、総パルスエネルギーが同じであるにも関わらず、パルス

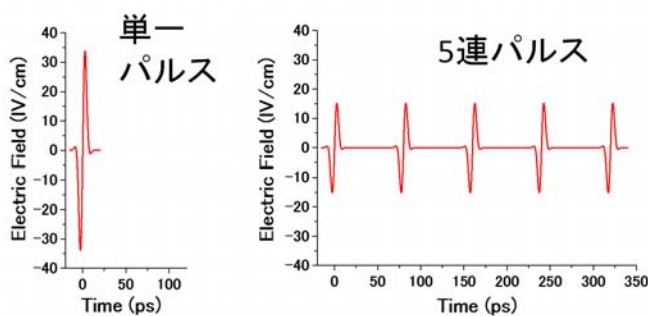


図 1 : 計算で用いた THz パルス (列)

列の構成パルス数を多くした方が分子軸整列をより増強する事がわかった。

等強度パルス列を得るためにはパルスの数だけ干渉計を組む必要があり、多連パルス列を生成する場合装置上の制約が生じる。そこで、エタロンキャビティを用いてより長いパルス列を生成し、それを用いて分子軸整列した結果について次に計算した。図3に、透過率0.3のエタロンキャビティを用いて生成した THz パルス列と、そのパルス列照射により生成する分子軸整列を示す。等強度パルス列の場合と同様に、パルスが照射されると軸整列が促進され、最終的に等強度5連パルス列の場合と比べてほぼ倍の軸整列度が得られた。

【今後の展望】本研究で得られた計算結果を実証してパルス列の有用性を示すため、現在実験的基盤技術開発を行っている。強い軸整列を生じさせるためには、強い THz 光源を開発する必要がある。10 $\mu\text{J}/\text{pulse}$ 級のパルスエネルギーの THz 光発生を目指して、高強度ピコ秒 1030 nm 励起光源の開発と、その励起光を用いた高強度 THz 光発生試験を行っている。現在 2 μJ のパルスが得られておりさらに高エネルギー化を図っている段階である。

また本研究の特色である THz パルス列の生成のために、THz 周波数領域で動作するエタロンが必要となるが、これについては既に開発を終え報告済みである[3]。現在はエタロンの変換効率のさらなる向上を目指している所である。当日はこれら基盤技術開発の進捗状況についても報告する。

【参考文献】

- [1] Fleischer, Zhou, Robert, Field, and Nelson, *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 163603 (2011),
- [2] Fleischer, Field, and Nelson, *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 123603 (2012),
- [3] Tsubouchi and Kumada, *Opt. Express*, **20**, 28500 (2012).

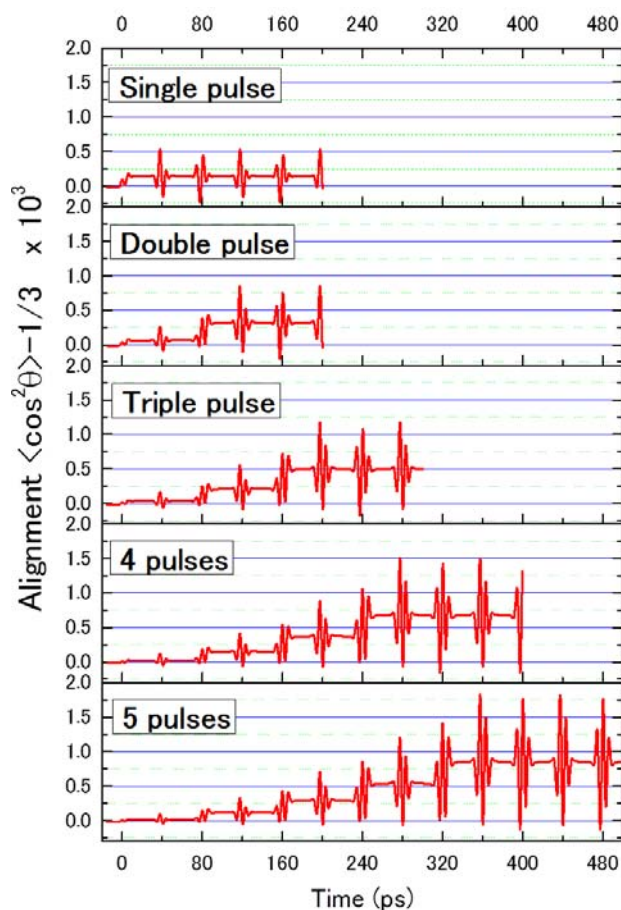


図2: THz パルス列照射により実現される分子軸整列の計算結果

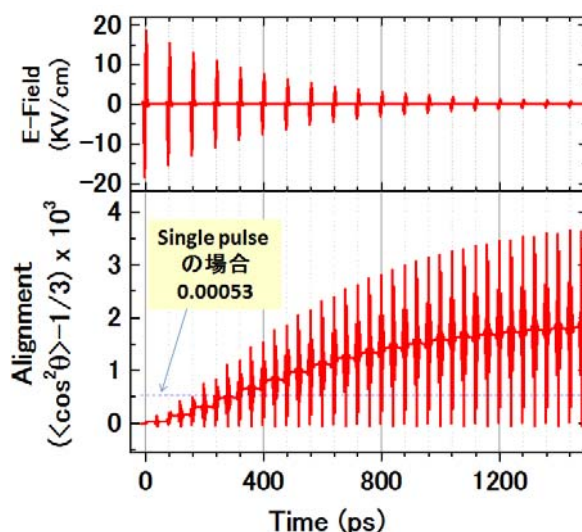


図3: (上図) 適用したパルス列。(下図) 実現される分子軸整列の時間変化。