

縮重電子状態を持たない芳香環分子のレーザー誘起 π 電子回転

¹トンドゥックタン大学, ^{2,4}国立交通大学, ³ドンガック大学
 峯尾 浩文¹, 八巻 昌弘², Gap-Sue Kim³, 寺西 慶哲⁴, 林 聖賢², ○藤村 勇一²

Laser induction of unidirectional pi-electron rotations in low-symmetry aromatic ring molecules

○Hirobumi Mineo¹, Masahiro Yamaki², Gap-Sue Kim³, Yoshiaki Teranishi⁴, Sheng H. Lin²,
 ○Yuichi Fujimura²

¹ *Department for Management of Science and Technology Development,
 Ton Duc Thang University, Vietnam*

² *Institute of Molecular Science, National Chiao-Tung University, Taiwan*

³ *Dharma College, Dongguk University, Korea*

⁴ *Institute of Physics, National Chiao-Tung University, Taiwan*

【Abstract】 π -Electron rotation is one of the fundamental dynamics in high-symmetry aromatic molecules having degenerate states. The resultant ring currents and current-induced magnetic fields play an important role in molecular spectroscopy. The unidirectional rotation of π electrons is generated by excitation of a degenerated electronic excited state by a circularly-polarized laser. On the other hand, it was a common understanding that low-symmetry aromatic ring molecules having non-degenerate states, such as chiral aromatic ring molecules, cannot create unidirectional π -electron rotations. In this paper, we present a new laser-control scenario of unidirectional π -electron rotations even in a low-symmetry aromatic ring molecule by using two linearly-polarized stationary lasers. The simulation results suggest an experimental realization of the induction of unidirectional π -electron rotations in low-symmetry aromatic ring molecules without using any intricate quantum-optimal control procedure. This may open up an effective generation method of ring currents and current-induced magnetic fields in biomolecules such as amino acids having aromatic ring molecules for searching their dynamics.

【序】 共役分子の物性・反応性は非局在性 π 電子によって決まる。最近、可視・紫外領域波長、フェムト・アト秒時間パルスレーザーを利用して、 π 電子の運動を制御し、新奇な物性・反応を誘起させようとする研究が注目されている。低対称性の芳香環分子は縮重電子状態を持たないので、通常は環電流が生成されない。しかし、レーザーのコヒーレンス性を利用することにより、直線偏光短パルスレーザー誘起環電流と逆ファラデー効果が得られる[1, 2].

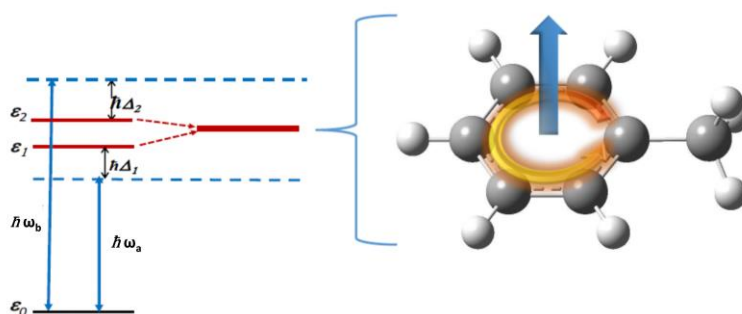


Fig. 1. Dynamics Stark effect on toluene

キラル芳香環分子に於いて定常的 π 電子回転を誘起するレーザーパルスを量子最適制御法により設計することができる[3]. 今回は、現在のレーザー技法内でおこなえる動的 Stark 効果を利用する π 電子回転制御法を紹介し、トルエン分子に適用する[4].

【方法 (理論)】 基底状態 ϕ_0 エネルギー $\varepsilon_0 (\equiv \hbar\omega_0)$ 、2つの電子励起状態 ϕ_1 、 $\varepsilon_1 (\equiv \hbar\omega_1)$ と ϕ_2 $\varepsilon_2 (\equiv \hbar\omega_2)$ からなる3電子状態モデルを考える (図1). 分子振動効果は無視する. 初期位相 (ζ) 直線偏光 (μ) のレーザー a と b をそれぞれの励起状態に照射する. 電子状態の時間発展は (1) を解くことによって得られる.

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} = [H_0 + V(t)]\Phi(t). \quad (1)$$

ここで、 $H_0\phi_i = \varepsilon_i\phi_i$, $V(t) = \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{e}_a F_a \cos(\omega_a t - \zeta_a) + \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{e}_b F_b \cos(\omega_b t - \zeta_b)$ は電子とレーザー電場の相互作用項. レーザー (a, b) の detuning は $\Delta_1 = \omega_a - \omega_{10} < 0$, $\Delta_2 = \omega_b - \omega_{20} > 0$.

$$(1) \text{ の解は, } \Phi(t) = c_0(t)\exp(-i\omega_0 t)\phi_0 + c_1(t)\exp(-i\omega_1 t)\phi_1 + c_2(t)\exp(-i\omega_2 t)\phi_2. \quad (2)$$

角運動量演算子 (\hat{l}) の期待値、時間依存 π 電子角運動量は

$$L(t) = -2\hbar \text{Im}(l_{12}) \text{Im}[c_1^*(t)c_2(t)\exp(-i\omega_2 t)], \text{ ここで, } l_{12} = \langle \phi_1 | \hat{l} | \phi_2 \rangle.$$

2つのレーザーの相互作用項がお互い等しく、さらに、detuning の絶対値が等しい条件下で解析解を得る.

【結果・考察】 図2は、導出された式を用いて得られたトルエンの π 電子の角運動量の電場依存性を示す. 2つの直線偏光レーザー場の位相差 ζ が $-\pi/2$ の場合である. 角運動量はほぼ正の値をとり、 π 電子がベンゼン環の逆回りの非定常運動をしている. π 電子のラビ振動数、回転周期などの物理量も得ることが出来る. 詳細は講演発表時に説明する.

この方法は高度なコヒーレント制御技法は不必要である. 具体的には、生体分子、例えば、キラルな phenylalanine 分子の同定が可能か実験検証する価値がある.

【参考文献】

- [1] M. Kanno, *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **45**, 7995 (2006).
 [2] H. Mineo, *et al. J. Am. Chem. Soc.* **134**, 14279 (2012).
 [3] M. Yamaki, *et al. Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 1570 (2016).
 [4] H. Mineo, *et al. ibid.* **18**, 26786 (2016).

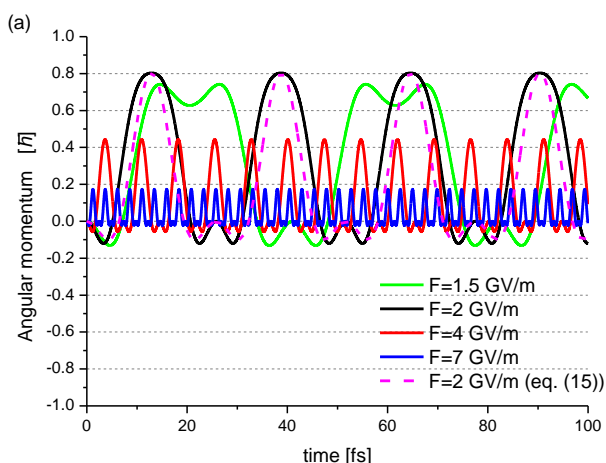


Fig. 2. Expectation values of angular momentum operator for toluene.