

3Ta01 低温分子の生成・反応ダイナミクスとその分光

○遠藤泰樹

東京大学大学院総合文化研究科

Production, reaction dynamics and spectroscopy of low temperature molecules

Yasuki Endo

Graduate School of Arts and Sciences, The University of Tokyo

Inspired by the realization of Bose-Einstein condensation (BEC) of low temperature atoms, cooling of molecules well below 1K has attracted attention quite recently. Molecules in low temperature quantum media, such as the solid hydrogen or liquid He droplets have also been investigated vigorously. Furthermore, it is well recognized that the supersonic expansion method had opened a new field to study molecules with temperatures down to 1K. A large number of molecular complexes have been studied using the method, providing detailed understandings on the intermolecular interactions. Reaction dynamics of molecules in low temperature is also considered to be important in astrochemistry. Considering these research trends, systematic studies of low temperature molecules, investigating efficient production of low temperature molecules, their detection, and their reaction dynamics, should now be promoted.

原子や分子を冷やして熱的ゆらぎのない環境にすると高温では統計平均の陰に隠されて見えなかった量子現象や量子効果が顕著に現れることがわかってきた。レーザ冷却法による原子のボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) の実現はその典型であり、基礎物理学の分野に大きなインパクトを与えることとなった。しかしながら、球対称で内部自由度の乏しい原子では、1 K 以下に冷やしていても BEC の相転移までは何も新しい物理現象は起こらなかった。つまり、原子冷却の目的はすなわち BEC の実現とみなされている。一方、内部自由度の大きい分子では、低温にすることで BEC に達する以前にも様々な興味深い化学現象の発現が期待される。現在、通常の実験条件で実現できる 1 K の分子の世界から、BEC の条件が満たされる 100 nK までの 7 けたの温度領域は、分子化学の未開拓領域であり、ここに新しい化学の可能性を見いだすことが出来るであろう。

温度が 1 K 程度までの冷却分子は、気相では超音速ビーム法、凝縮相では様々な冷媒中に分子をトラップすることで得られる。特に近年は、凝縮相の中でも量子性が高い媒体として、超流動液体ヘリウムや、真空中のヘリウム液滴が新しい冷却媒体として注目を集めている。温度が 1 K 程度まで冷却された分子は、その内部状態

が電子、振動、回転の最低エネルギー準位をとる単一量子状態にあるものであり、すでにこの温度でも常温の様々な熱運動の中に埋もれてしまった分子の様々な特徴が現れる。すでにこれまでに多くの研究の蓄積のある分子間錯体の研究では、分子間相互作用の詳細が多くの系で明らかになってきている。また、固体水素やヘリウム液滴中にトラップされた分子の研究では、媒質との相互作用、トラップされた分子の運動、さらには媒質中での化学反応などに新しい知見が得られてきている。

温度領域が数K~数十Kの化学反応は、星間空間の分子進化とも密接に関係している。星間における化学反応は、その環境の特殊性のために、地球上とは大きく異なることが知られているが、まだまだ未解明の問題を数多く抱えている。例えば、宇宙に「大量」に存在する水素分子 (H_2) の生成機構さえもまだよくわかっていない。一つの大きな問題にこの温度領域での反応速度を直接正確に測定できる実験手法がほとんどない、ということがある。また、宇宙空間の反応は気相反応だけではなく、宇宙に漂う塵の表面での反応が重要な役割を果たしている。宇宙空間での化学反応の理解には、低温での化学反応速度の測定技術の開発といった、「低温化学」の新しい分野の開拓が必要である。

これまでに実現されている 1 K という温度以下に冷却された分子を生成し、分子における BEC を実現するには、さらに新しい技術が必要とされる。また、冷却分子の利用度を広げるためには冷えた分子を捕捉しその場に留めて置くためのトラップ技術も不可欠である。例えば、超音速では 1 K 程度まで冷却した分子を生成できるが、この方法には分子の捕捉能力が欠けている。捕捉されるためには並進エネルギーが、トラップのポテンシャルより小さくする必要がある。極低温に冷却された分子の捕捉のために提案されている光双極子トラップを使うとすると、そのポテンシャルの深さは $T = 10 \text{ mK}$ 程度しかないので、速度としては数 m/s まで減速してやる必要がある。

原子で実現された BEC に近い条件を分子で作り出すための様々な提案、試みも近年盛んになされてきている。一つの可能性は、原子の冷却に用いられた光学的手法によるものであるが、分子では振動・回転の内部自由度のためそのままでは適用できない。この困難を克服するためのアイデアが、いくつか提案されている段階である。低温分子を準備するもうひとつの方法として、光会合反応を用いるものがある。具体的にはあらかじめレーザー冷却した極低温原子集団の共鳴ラマン過程で、反応の余剰エネルギーを取り去るというものである。すでに BEC 状態のアルカリ原子やアルカリ土類金属原子を用いた実験がなされており、原子レーザーから分子レーザーへの道を開くものとして、将来性が期待されている。

低温分子の科学を進めるためには、理論の果たす役割も重要である。遠く隔たった分子間に働く相互作用はどのように記述されるか。光を用いた冷却で、光と分子の相互作用はどのようになるか、その相互作用をどのように利用して分子を冷却できるか、低温の分子の化学反応ダイナミクスはどのようになるのか、など今後開拓されるべき分野は様々に広がっている。