

## 強光子場による分子配向と分子パラメータの非対称性

(東大院理) 竹本典生, 佐甲徳栄, 山内 薫

## 【序】

強光子場 ( $10^{12}$ -  $10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>) 中の気体分子は、レーザーの偏光方向に配向し、ペンデュラー状態と呼ばれる特異な回転状態を形成する。レーザー電場によるペンデュラー状態の形成 [1] が直線分子について提唱されて以来、理論・実験の両面から活発な研究が行われてきた。本研究では、非対称コマ分子のペンデュラー状態について基本的な理解を得ることを目指し、分子の慣性テンソルおよび分極率テンソルの異方性が配向度に与える影響を理論的に考察した。

## 【方法】

非対称コマ分子のペンデュラー状態のハミルトニアンは

$$H = H_0 + H_{\text{ind}} \quad (1)$$

$$H_0 = \left( \frac{B+C}{2} \right) J^2 + \left( A - \frac{B+C}{2} \right) J_a^2 + \left( \frac{B-C}{4} \right) [(J^+)^2 + (J^-)^2] \quad (2)$$

$$H_{\text{ind}} = -\frac{1}{4} \epsilon_0^T \alpha \epsilon_0 \quad (3)$$

と表わされる。ここで、 $\epsilon_0$  は直線偏光レーザーの電場ベクトル、 $\alpha$  は分極率テンソルである。回転定数に関する Ray の非対称性パラメータ  $\kappa = (2B - A - C)/(A - C)$ 、および対応する分極率の異方性パラメータ  $\eta = (2\alpha_{bb} - \alpha_{aa} - \alpha_{cc})/(\alpha_{aa} - \alpha_{cc})$  を変化させながら、ハミルトニアン (1) の固有状態を求め、配向度を表わすパラメータ  $\langle \cos^2 \beta \rangle$  との相関を調べた。ここでオイラー角  $\beta$  は、非対称コマ分子の  $a$  軸とレーザーの電場ベクトルの方向とのなす角に相当する。

## 【結果と考察】

ペンデュラー基底状態の  $\langle \cos^2 \beta \rangle$  を  $\kappa, \eta$ -平面上にプロットしたものを図 1 に示す。扁平対称コマにおいて  $\kappa = 1, \eta = 1$ 、そして、扁長対称コマにおいて  $\kappa = -1, \eta = -1$  である。ここで、回転定数  $A, C$  を固定して  $B$  を変えることにより  $\kappa$  を変化させ、分極率テンソルについても  $\alpha_{bb}$  のみを変えて  $\eta$  を変化させている。なお、 $A = 60.485$  GHz,  $C = 8.846$  GHz,  $\alpha_{aa} = 5.49 \text{ \AA}^3$ ,  $\alpha_{cc} = 2.72 \text{ \AA}^3$ ,  $I = 10^{12}$  W/cm<sup>2</sup> である。この図から、慣性テンソル、分極率テンソルが扁平対称コマに近づくにつれ、配向度が急激に低下することが分かる。これは、 $a$  軸方向の分極率  $\alpha_{aa}$  と  $b$  軸方向の  $\alpha_{bb}$  が近づくにつれ、 $b$  軸が  $a$  軸に競合してレーザー偏光方向に配向するようになるためである。また、回転定数  $B$  が

$A$  に近づくにつれ、 $b$  軸周りの回転が容易になり  $a$  軸のレーザー偏光方向への配向は崩れていく。実際、分子の  $a$  軸の空間分布は  $\kappa, \eta$  の変化にしたがって図 2 (a)-(c) のようになり、扁平コマに近づくにつれ  $a$  軸の配向と  $b$  軸の配向が競合し、 $a$  軸の配向度が低下していく様子がみられる。ただし、図 2 ではレーザー電場の方向を空間固定の  $Z$  軸にとってている。

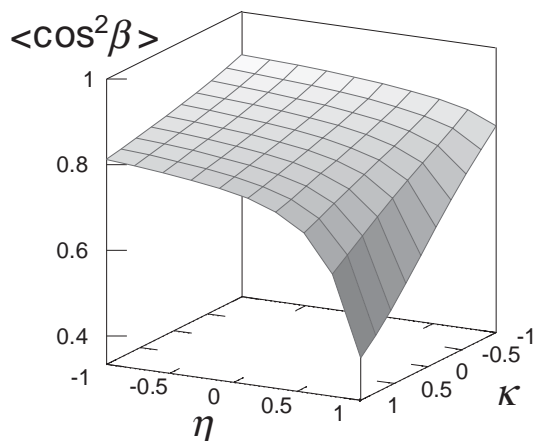


図 1 ペンデュラー基底状態の配向度  $\langle \cos^2 \beta \rangle$  の非対称性パラメータ  $\kappa, \eta$  に対する依存性

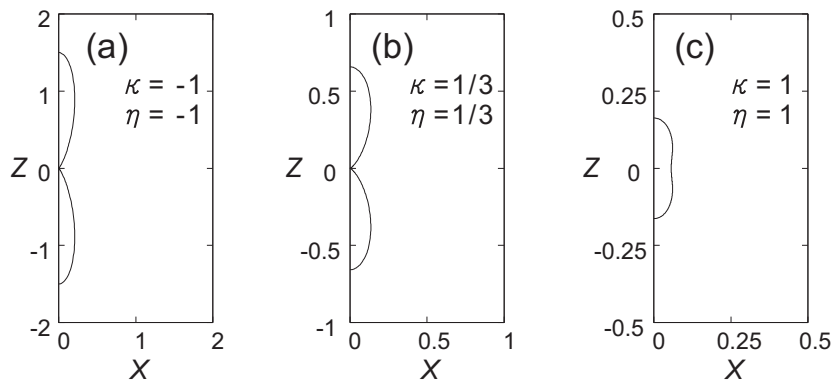


図 2  $a$  軸の空間分布。基底状態の波動関数  $\Psi(\alpha, \beta, \gamma)$  に対して、 $Z$  軸まわりのオイラー角  $\alpha$  を 0 に固定して、 $a$  軸方向に  $2\pi|\Psi(\alpha=0; \beta)|^2$  を動径プロットした。

#### 【参考文献】

- [1] B. Friedrich and D. Herschbach, *Phys. Rev. Lett.* **74** 4623 (1995), *J. Phys. Chem.* **99** 15686 (1995).