

ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-1. 高分解能分光
小項目	1-1-3. 可視・紫外高分解能分光

概要（200字以内）

分子の励起状態を分光学的手法によって詳細に調べることにより、励起分子の構造や変化といった基本的性質を知ることができる。狭線幅レーザー光を用いた可視・紫外高分解能分光により、分子の励起状態を電子・振動・回転エネルギー準位構造まで詳細に観測して、分子構造を決定するとともに、スペクトル線の位置、強度、幅などの変化から励起状態における相互作用を解明することが期待される。

**「レーザー光の単色性の良さを活用した光科学」に関する研究 → 高分解能分光**

現状と最前線

単色性の良い波長可変レーザーの発明は、従来の分光器の分解能の限界をはるかに超えた高分解能レーザー分光を可能にした。そのために必要なのは、

- ① 狭線幅かつ安定に波数掃引が可能な可視・紫外レーザー光源
- ② レーザー光の波数を高精度に読み取る計測システム
- ③ 気体分子の並進運動に起因する線幅の拡がりが見れない分光法 [ドップラーフリー分光法]

の3つである。

可視光領域における高分解能分光では、原子や二原子分子の励起状態の精密計測が数多く行われており、最近では限られた波長領域に対して、非常に高分解能かつ高精度な観測による周波数標準に関する研究が2006年のノーベル物理学賞に輝いたことは記憶に新しい。また、レーザー冷却と組み合わせてボースアインシュタイン凝縮の観測を目指した研究も展開されている。

一方、化学の領域として、多原子分子の励起状態を観測するには、紫外領域で広い波長範囲を測定する必要がある。これまでの研究の多くは紫外パルスレーザーを用いた低分解能スペクトル測定による振電バンドの観測や寿命の測定であった。

最近では、紫外領域で発振する狭線幅で安定な波長可変レーザーシステムが開発されるに伴い、多原子分子についてもドップラーフリー分光法を用いた研究が遂行され、単一のエネルギー準位にまで分離して精密に観測することが実現しつつある。このとき、スペクトルが非常に複雑であるため解析は主にシミュレーションとの比較に頼ることが多いこと、絶対波数精度が良くないために微小なスペクトル変化を見つけることが困難であることが問題点であろう。

今後、絶対周波数精度の向上、より高感度な検出手法の開発、スペクトル線を確実に帰属する方法、外部電場や磁場の影響の観測、等によって、より微小なスペクトル線の線形、線幅、強度の変化が観測されるようになれば、分子構造のみならず、励起状態の寿命、分子内エネルギー移動、分子の光解離反応等の動的挙動・ダイナミクスを発見・説明することが期待できる。

#### 将来予測と方向性

##### ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

レーザー光の周波数安定性の向上による、より高分解能なスペクトルの観測。新しい周波数標準や光コムなどの新しい技術を利用した周波数精度向上。これらにより、励起分子のさらに詳細な構造や変化を観測することが可能となる。

光・光二重共鳴法の利用による光励起準位の選別を行うことで、これまでに解析不能であった複雑なスペクトルを、確実に帰属して励起状態における複雑な相互作用を説明する。

##### ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

上記研究を踏まえて、より複雑な分子について分子内運動や光解離機構などを説明する。これまで単にシミュレーションで分子構造を理解する程度であったが、直接スペクトルの微小変化をとらえることで、メチル基や水酸基などが付加した多原子分子における分子の内部回転や大振幅振動などの内部運動を説明する。

#### キーワード

紫外レーザー、高分解能分光、ドップラーフリー分光、状態間相互作用、周波数標準

(執筆者： 笠原 俊二 )