

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	1-1-6. 低温分子の高分解能分光

概要	
<p>今後、高分解能分光の研究対象として注目される低温分子としては、1) 量子凝縮相中にドーブされた分子、と2) 気相中の冷たい分子がある。特に後者は原子のレーザー冷却とそれに続くボーズ・アインシュタイン凝縮の実現という革新的な研究に触発され、分子においても究極の低温量子状態を実現し、新奇な化学の世界を切り開こうとする研究が始まっている。高分解能分子分光学はそのための必要不可欠の基盤技術であると共に、低温分子の実現によって初めて可能となる超高精密分光測定によって、分子を自然科学の基本原理を究明する主役の舞台に引き上げることになるであろう。</p>	<p>Table of Contents 新しい低温分子の高分解能分光</p> <p>1) 量子凝縮相     パラ水素結晶     He 液滴</p> <p>2) 気相冷却分子 (冷たい分子)     He バッファーガス冷却     静磁場・静電場トラップ     光トラップ</p> <p>3) 将来予測と方向性     応用と展開</p>
現状と最前線	
<p>1) 固体結晶にドーブされた分子の場合、たとえ極低温希ガスマトリクスのような相互作用が比較的小さいとされる結晶であっても、そのスペクトル線幅は気相に比べて2桁以上太くなることが知られていた。しかしながら、シカゴ大学の岡グループはパラ水素結晶においては、その振動・回転準位間のスペクトル線幅は気相中よりも狭いことを見いだした。さらに彼等はパラ水素結晶中にドーブしたメタン分子の振動回転遷移についても 100MHz 程度の狭いスペクトル線を観測し、固相中であっても分子の振動・回転運動が量子化され固有状態と存在していることを示した<sup>1)</sup>。同様に、超流動 He 液滴中にドーブした分子の赤外線スペクトルにおいても、狭いスペクトル線が観測されている。これらの観測事実は媒質の有する量子的性質に由来するものなので、量子凝縮相中の高分解能分光学と呼ばれる新しい研究分野が誕生した。</p> <p>2) 従来の気相における低温分子の研究は超音速分子ジェット法が中心であった。この方法は高圧の気体試料をピンホールから真空層に噴出させる際の断熱膨張過程によって、内部エネルギー並進速度の進行方向成分のばらつきを小さくするもので、数 K 相当までの冷却分子を実現している。しかしながら、並進の絶対速度は大きいままなので、観測視野から短時間で外れてしまい、同じ分子を長時間観測することは難しい。究極の高分解能分光において分解能を制限するのは相互作用時間幅 (1 分子が光とコヒーレントに相互作用できる時間の逆数に相当)</p>	

なので、観測視野に長時間留めておくためには分子の並進速度を減速すること、すなわち、分子冷却が必要となる。しかしながら、分子の場合は原子と違って、振動・回転の自由度があるために、レーザー冷却法が有効には使えない。そこで、分子を室温から冷却する方法としては He バッファースガス冷却が汎用性の高い方法として使われており、その冷却限界は液体 He 温度程度となる。また空間捕捉の手段としては双極子が不均一な静磁場や静電場から受ける力を使って、1K 程度の分子を捕捉することができている。ただし、静磁場トラップが有効に働くのは常磁性を有するラジカル分子に限定されるし、静電場トラップが使える分子は大きなシュタルク効果を持つ極性分子に限定される。また、いずれのトラップも、いわゆる高勾配志向である回転の基底 ( $J=0$ ) 状態を捕捉できないという欠点がある。そこで、すべての分子の任意の状態に適用できる汎用性のある手法として光トラップが提案されているが、これは二階の分極テンソルに由来する小さな効果を用いるものなので、捕捉ポテンシャルの深さは mK 程度と小さい。したがって、バッファースガス冷却による到達温度 K を越えて mK まで冷却する手法の開発が最前線の研究課題となっている。そして、mK の分子が空間捕捉された後には、蒸発冷却法や赤外レーザー冷却法を用いてさらなる冷却を続け、最終的には分子のボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) 状態の生成を目指して研究が推進されるであろう。

これらの冷却分子を高分解能分光の観点からとらえると、その並進速度が 1cm/s となる  $\mu\text{K}$  領域で相互作用時間幅が 1Hz となり、光の周波数の 14 桁の精度の分光測定が可能となる。この程度の精度があれば、現代物理学が予言する自然界の基本問題、例えば、パリティ対称性の破れ<sup>2)</sup>や超微細構造定数  $\alpha$  の時間不変性等を、冷たい分子のスペクトルの超精密分光測定を通して検証することが十分可能になる。

- 1) 百瀬孝昌, 分光研究, 45, 125-137 (1996),
- 2) M. Quack, Angew. Chem. Int. Ed., 41, 4618 (2002)

#### 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
  - 気相分子の基底状態の mK 冷却と空間捕捉
  - 量子凝縮相における振動回転状態の理解とそのコヒーレント操作
    - 分子の振動回転準位を qubit とする分子量子コンピューティングの研究
- ・ 10 年後までに解決・実現が望まれる課題
  - 気相分子の  $\mu\text{K}$  の冷却の実現
    - 分子の電子・核スピン準位間の精密測定による超微細構造定数  $\alpha$  の時間不変性の検証
    - キラル分子を使ったパリティ対称性の破れの検証実験
    - 分子 BEC の実現 (nK 領域)

#### キーワード

冷たい分子、量子凝縮相、バッファースガス冷却、空間捕捉、超高精度分光測定、分子 qubit

(執筆者: 金森 英人 )