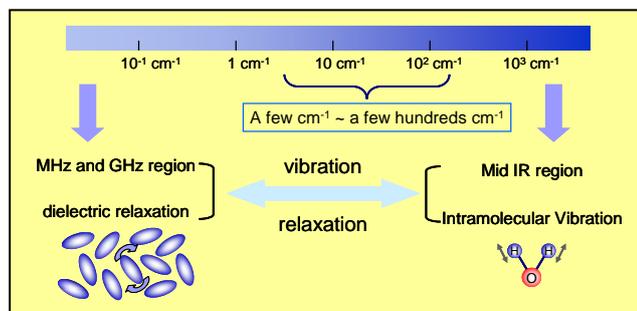


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-2. 時間分解分光
小項目	1-2-5. テラヘルツ領域の超高速計測

概要（200字以内）

0.1 THz から数十 THz の周波数領域のテラヘルツ領域の電磁波を用いた分光が近年盛んに行われている。フェムト秒レーザーを用いたテラヘルツ電磁波の発生と検出技術が格段に進歩し、高精度の低振動スペクトル測定が可能となった。現在、その手法は様々な分子に応用され、凝縮系における分子間振動や分子の集団運動の研究に用いられている。



現状と最前線

「テラヘルツ」という言葉が示す周波数範囲は、分野によって多少異なるが、一般に「電波」と「光波」の境界領域の0.1 THz から数十 THz の範囲をさすことが多い。この波数領域では、分子の大振幅振動や、分子間振動、会合性液体の集団運動、高分子の構造変化、溶液中での回転緩和などが特徴的な周波数を持つ。テラヘルツ領域は、低周波側は誘電測定、高周波側は赤外分光（振動分光）の間に位置し、この領域の分光は、1950年代以降、遠赤外分光としての積み重ねがあるが、この範囲の電磁波、その発生・制御・検出が一般には困難であった。しかし、近年、活発に研究が進められ、技術的な進歩が著しい。テラヘルツ波領域の技術革新としては、高出力で広帯域にわたって波長可変な自由電子レーザー、小さくて取り扱いが容易な半導体の量子カスケードレーザー、非線形結晶による二波長混合などをあげることができる。

フェムト秒レーザーパルスを用いた広帯域テラヘルツ波パルス（テラヘルツモノサイクル波）の発生とコヒーレント検出の手法は現在広く用いられている。発生方法には、光伝導アンテナにおける光励起によるキャリアの生成、二次的非線形感受率の高い非線形結晶における光整流、半導体表面におけるフォトデンバー効果などをあげることができる。コヒーレント検出には、光伝導アンテナを用いる方法や電気光学現象を利用した方法などがある。

このテラヘルツ波を用いて、電子材料、新材料分析などの工業応用、バイオ・医療応用、防犯・安全応用などの広い分野で研究開発が進められている。分子分光としては、固体結晶のテ

ラヘルツ領域のスペクトルが高精度で測定できるようになり、生体関連分子や有機分子など、多くの分子がその対象となっている。実験的に得られたテラヘルツスペクトルが分子軌道計算を基にして比較検討されているが、強い分子間力が存在しない場合は、一般には孤立分子の計算結果で説明することができる場合が多い。しかし、分子間水素結合が存在する系においては、その一致は悪く、結晶の周期構造を取り入れ、第一原理から計算する手法の確立が必要である。タンパク質などの生体高分子は機能発現の際に大きな構造変化を伴うことが多く、特徴的な振動モードをテラヘルツ領域に持つものと考えられている。機能発現と低振動運動の関連を調べるために、タンパク質のテラヘルツ電磁波による測定が行われているが、インパクトの強い研究はいまだされていない。また、光パルスにより試料を励起し、それから発生するテラヘルツ波の波形の解析や、過渡的な状態をテラヘルツ波パルスでプローブする分光なども行われている。

参考文献：

阪井清美、廣本宣久：分光研究 54, 43 (2005).

阪井清美：分光研究 50, 261 (2001).

萩行正憲：分光研究 54, 181 (2005).

西澤潤一編著：テラヘルツ波の基礎と応用（工業調査会、2005）.

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

分子間水素結合が存在する系において結晶の周期構造までを取り入れた理論計算との比較検討を行うこと。低振動領域における溶媒-溶質間の相互作用を定量的に明らかにすること。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

生体高分子の機能発現と低振動運動の関連を明らかにすること。

キーワード

テラヘルツ波、遠赤外分光、分子間振動、回転緩和、大振幅振動

(執筆者： 富永 圭介)