18p-PA4-1

Pump-dump 法によるホット分子コヒーレント制御の FDTD-Q 解析

FDTD-Q analysis of coherent control of hot molecules by using pump-dump scheme

新潟大自然研[1]，新潟大超域[2]　○喜多 涼介[1]，岡 寿樹[2]

Niigata Univ.[1], Niigata Univ.[2], ○Ryosuke Kita[1] and Hisaki Oka[2]

E-mail: h-oka@eng.niigata-u.ac.jp

1. はじめに

コヒーレント制御は、光を用いて物質の量子状態を直接制御する技術であり、物理学や化学、情報科学などの幅広い分野で様々な応用が期待されている。特に化学分野では、光反応による反応収率の向上やその制御の可能性を秘めており、現在精力的に研究されている。しかし化学反応への応用においては、パルスの入射タイミングや最適パルス波形の予測等の解析が難しく、数値計算を用いた解析が必須となる。そこで本研究では、有限差分時間領域法(FDTD 法)をシュレーディンガー方程式の解法に適用した FDTD-Q 法[1]を、分子振動解析に応用し、そのダイナミクスを可視化する簡便な数値計算法を構築したので報告する。Pump-dump 法によるホット分子生成のコヒーレント制御[2]を例に、FDTD-Q 法の有用性を示す。

2. 解析モデル

図 1 に解析モデルの概念図を示す。実際の実験系[2]と比較するために K_2 分子の基底状態($^1\Sigma_g^+$)と励起状態($^1\Pi_u$)を考え、pump-dump 法による基底状態熱振動の光による選択的励起を FDTD-Q 法で解析する。分子の断熱ポテンシャルは、Morse ポテンシャルを用いて近似し、ポテンシャル変数は文献[3]を参考にした。Pump パルスは、波長 631 nm、パルス幅 70 fs、dump パルスは、波長 690 nm、パルス幅 70 fs のガウスパルスとする。フランクコンドン解析から pump パルスは励起状態の v=5 の振動電子状態を最も効率よく励起し、また dump パルスは励起状態 v=5 から基底状態の v=9 の遷移波長に共鳴するように設定した。Pump-dump 間の入射遅延時間を τ [fs]とし、τ を変化させながら、基底状態の ν =9 に効率的に遷移させる最適遅延時間を求める。

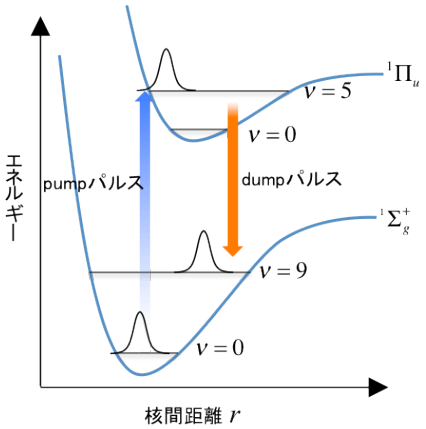

図 1　解析モデルおよび pump-dump 法の概念図

3. 計算結果

計算結果を図 2 に示す。定常状態における基底状態 ν =9 の振動準位数をパルス遅延時間 τ [fs]の関数としてプロットした。$\tau \approx$ 300fs、600fs、900fs で準位数が鋭く増加していることから、効率的に振電状態を励起できていることが分かる。また τ を制御することで v=9 の励起を抑制することも可能であることが分かる。計算結果から得られる dump パルスの最適入射タイミングの周期はおおよそ 300fs である。実際の実験では基底状態の ν =7 で最も準位数が増加し、最適パルス遅延時間はおおよそ 200fs である。これは断熱ポテンシャルを近似した際の誤差だと考えられ、FDTD-Q 法による解析が有用であることが分かる。

発表では、光による熱反応励起とその制御の可能性についても議論する予定である。

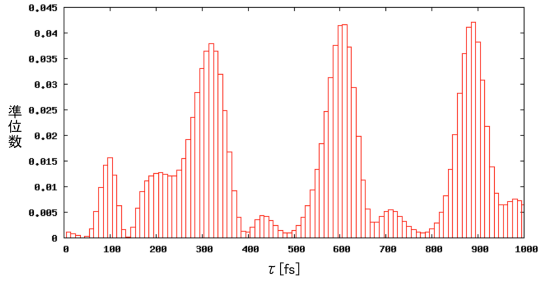

図 2　基底状態準位数 ν =9 のパルス遅延時間 τ 依存性

参考文献

[1] A. Soriano *et al.*, J. Appl. Phys. **95**, 8011 (2004).

[2] R. Pausch *et al.*, J. Chem. Phys. **110**, 9560 (1999).

[3] V. M. García *et al.*, J. Chem. Phys. **109**, 504 (1998).

© 2014 年　応用物理学会