

# 高強度 THz パルスによる分子振動多段励起ダイナミクスの FDTD-Q 解析

## FDTD-Q analysis of molecular vibrational stepwise excitation using intense THz pulse

新潟大自然研<sup>1</sup>, 新潟大工<sup>2</sup> ○小板橋 遼太<sup>1</sup>, 岡 寿樹<sup>2</sup>

Niigata Univ.<sup>1</sup>, Niigata Univ.<sup>2</sup>, °Ryota Koitabashi<sup>1</sup>, Hisaki Oka<sup>2</sup>

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

### 【研究背景】

近年の THz 光源開発技術の進歩により、高強度広帯域 THz パルスの生成が可能になってきた。THz 波はその周波数帯域から分子振動や分子回転を直接励起することができるため、高強度超短 THz パルスを用いれば、非摂動的な分子振動の多段励起や分子振動波束のコヒーレント制御への応用が期待できる[1]。しかし、コヒーレント制御を行うには入射波の厳密なパラメータ設定が必要であり、更に高強度励起では摂動論による解析的手法が難しいため、数値解析による予測が極めて有効になる。

そこで本研究では、THz 波励起による分子振動数値解析の手法として、シュレディンガー方程式の時間発展を簡便に計算する手法である FDTD-Q 法[2]の応用を提案する。極低温 NaK 分子[3]を例に、高強度超短 THz パルスによる振動準位の多段励起ダイナミクスと緩和効果による準位占有数の時間変化を実時間解析し、本解析法の有用性を示す。

### 【解析方法】

図 1 に解析モデルを示す。NaK 分子の  $1^1\Sigma^+$  状態を解析対象とし、断熱ポテンシャルを Morse ポテンシャルで近似する。初期状態を振動準位  $\nu=0$  として、高強度 THz パルス照射による分子振動波束の高振動準位への多段励起時間発展を FDTD-Q 法を用いて数値解析する。入射パルスは周波数 3.673822 THz ( $\nu=1$  に共鳴)、電場振幅 5.0 GV/m、パルス幅 462 fs のガウシアンパルスとした。

緩和の効果は確率的 Schrödinger 方程式 [4] により FDTD-Q 法に導入する。具体的には乱数により緩和頻度  $\gamma$  で振動準位  $\nu=0$  へ全ての準位占有数を戻すことで縦緩和を導入する。緩

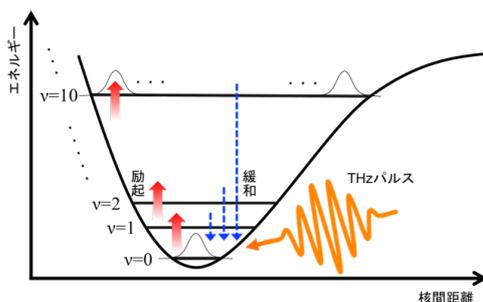


図 1. 解析モデル.

和頻度  $\gamma$  [Hz] は外部の熱エネルギーから算出した値を用いる。十分に大きいサンプル数に対しアンサンブル平均をとり、準位占有数の時間変化を求める。

### 【解析結果】

図 2 に準位占有数ダイナミクスの解析結果を示す。緩和は 77 K の熱エネルギー緩和として導入した。図 2(a) は振動準位  $\nu=1\sim 5$  の準位占有数の時間変化をプロットしたものである。解析結果から振動モードが  $\nu=1 \rightarrow \nu=2 \rightarrow \nu=3 \dots$  と多段的に励起されているのが分かる。また緩和により準位占有数が減少しているが  $t=3$  ps 辺りで  $\nu=1$  の準位占有数が一時的に増加していることが確認できる。図 2(b) は  $\nu=10\sim 14$  の高準位での準位占有数ダイナミクスの解析結果である。低準位と比較すると占有数は低いが振動モードの励起が確認できる。

このように非摂動的な高強度多段励起に対しても FDTD-Q 法による解析は有用であることがわかる。発表では、パルス列励起による更なる高準位励起の可能性や様々な緩和頻度に対するスペクトル解析を行う予定である。

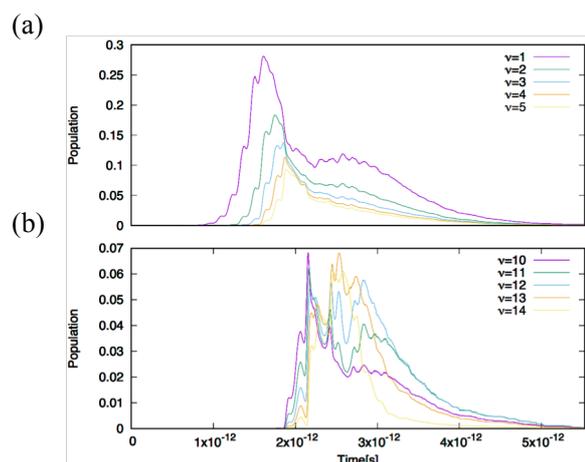


図 2. 準位占有数の時間変化. (a) 低振動準位. (b) 高振動準位.

### 【参考文献】

- [1] T. Kampfrath *et al.*, Nat. Photon. **7**, 630 (2013).
- [2] A. Soriano *et al.*, J. Appl. Phys. **95**, 8011 (2004).
- [3] L. W. Cheuk *et al.*, Phys. Rev. Lett. **114**, 193001 (2015).
- [4] C. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004)