

## キラル分子の二色円偏光高次高調波分光の第一原理シミュレーション (2)

### First principles simulation of bicircular high-harmonic spectroscopy of chiral molecules (2)

東大院工<sup>1</sup>, <sup>○</sup>福井 義光<sup>1</sup>, 織茂 悠貴<sup>1</sup>, 寺村 拓磨<sup>1</sup>, 佐藤 健<sup>1</sup>, 石川 顕一<sup>1</sup>

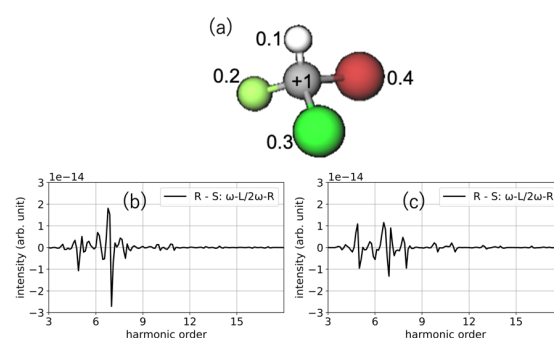
UTokyo<sup>1</sup>, <sup>○</sup>Yoshimitsu Fukui<sup>1</sup>, Yuki Orimo<sup>1</sup>, Takuma Teramura<sup>1</sup>, Takeshi Sato<sup>1</sup>, Kenichi Ishikawa<sup>1</sup>

E-mail: yoshimitsuf1996@atto.t.u-tokyo.ac.jp

キラル分子の鏡像異性体は他のキラルな対象と相互作用しない限り同じ物理的性質を持つ。医療で利用されるキラル医薬品は多岐にわたり、キラル分子の効率的な同定と分離は医学・生物学・産業応用等において非常に重要である。円偏光の基本波(周波数 $\omega$ )と逆回転の第2次高調波(周波数 $2\omega$ )の二色のレーザーを用いる,二色円偏光高次高調波分光(BHHS: Bicircular High-Harmonic Spectroscopy)は効率的なキラリティ識別の新たな方法の一つとして注目されている[1,2]。本研究では様々なキラルモデルのBHHSを電気双極子近似・磁気双極子近似・電気四重極子近似を用いて解析した。

キラル分子は一般に多電子系であり、分子内の多電子ダイナミクスを正確に記述する必要がある。そのため本研究では我々の研究室で開発されてきたTD-MCSCF法[3]を採用した。さらに分子とレーザー偏光面の相対的な配向に対するシミュレーション結果の平均をとることが必要である。そのため任意のレーザー偏光の計算が可能である一般曲線座標を用いた計算プログラムを用いて計算結果の効率的な配向平均法を実装した。電気双極子近似下では右手系と左手系の結果は一致すべきだが、空間グリッドの粗さのため数値的には一致しないという問題があった[4]。

Figure 1はキラル分子のモデル系について計



**Figure 1.** (a) A right-handed (R) isomer of a model one-electron chiral molecule with five potential centers having positive charges as depicted in the figure. (b)(c) The difference of strength of HHG between R and S isomers, (b) in the  $\omega$  left and  $2\omega$  right field, (c) in the  $\omega$  right and  $2\omega$  left field.

算を行ったもので、一電子モデルにおける電気双極子近似の結果である。本研究の配向平均法により、右手系と左手系からの高調波強度の差を $\pm 3 \times 10^{-14}$ に抑えることに成功した。発表では磁気双極子相互作用を含めた計算結果も示し、BHHSのキラル分子の選択性について議論する。

#### 参考文献

- [1] Y. Harada *et al*, Phys. Rev. A, 98, 021401 (2018)
- [2] D. Ayuso *et al*, Nat Photonics, 13, 866 (2019).
- [3] T. Sato and K. L. Ishikawa, Phys. Rev. A, 91, 023417 (2015)
- [4] 福井義光, 織茂悠貴, 寺村拓磨, 佐藤健, 石川顕一, 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会(2021), 10p-N107-6