

テラヘルツ光の化学応用の可能性

(理研 光量子) ○保科 宏道

Potential for chemical applications of terahertz light (*RIKEN Center for Advanced Photonics*)
○Hiromichi Hoshina

Terahertz (THz) light is an electromagnetic wave with a frequency around 1 THz (10^{12} Hz). THz frequency lies in the boundary region between radio waves and optical light and has properties of both. As radio-wave, THz wave shows high permeability to soft materials such as plastics and papers. On the other hand, as light, THz light shows rectilinear propagation, which enables imaging using lenses and mirrors. In addition, the spectral information of THz light from a material provides rich information about structure.

Spectra in the THz frequency region reflect material structures, and the spectra can be used as "fingerprints" for materials. Since THz light can transmit soft materials, THz spectroscopy can be used for nondestructive inspections. For example, in the field of safety and security applications, the use of THz spectroscopy has been proposed for the non-invasive inspection of illegal drugs in the envelopes using fingerprint spectra of chemicals. In the field of cultural heritage protection, pigments underneath paintings are identified. In the field of infrastructure aging inspection, corrosion under the coatings is detected.

Since such THz spectral structure originates in the intermolecular structures rather than molecular structures, the spectral shape depends on the phase of materials. In the gas phase, molecular rotation is observed; in liquids, rotational relaxation and libration are observed; and in solids, intermolecular vibration and phonon bands are observed. For crystalline organic materials, characteristic peaks reflecting the crystal structure are observed. Therefore, slight changes in crystal structure or crystallinity can be directly observed from the spectra. For example, THz spectroscopy can be used to monitor crystal polymorphism in the pharmaceutical field and to observe the higher-order structure of polymers in the polymer field.

One of the characteristics of THz spectroscopy is its high sensitivity to water; the absorption intensity of water in the THz band is quite high, making it possible to detect minute amounts of water. The spectra of water in the THz region show rotational relaxation, intermolecular vibrations, and libration, which provides information of the dynamics of water molecules. THz spectroscopy can be used to observe the spectra of small amounts of water, such as bound water in polymers, and to elucidate their dynamics.

In this talk, the fundamental of THz spectroscopy will be demonstrated, and the potential of chemical applications of THz light will be discussed.

Keywords : Terahertz, Spectroscopy, Imaging

テラヘルツ(THz)光は、周波数がおよそ 1THz (10^{12} Hz) 付近の電磁波を指す。THz 光は電波と光の境界領域に存在し、その両方の性質を併せ持つ。THz 光の電波的な性質には回折や透過性があり、プラスチックや紙などのソフトマテリアルに対する透過性の高さが挙げられる。一方、光としての性質としては直進性の高さがあり、レンズやミラーを用いた結像系の構築が可能である。さらに、物質を透過・反射した THz 光

の「色」情報，すなわち分光スペクトル情報は，様々な物質についての豊富な情報を与えてくれる．

THz 周波数帯の分光測定では，物質の構造や分子のダイナミクスを反映したスペクトルが得られるため，それらを「指紋」として，物質の同定や構造解析に活用できる．特に，THz 光が被覆物に対して透過性が高いことを利用した透視イメージングは様々な非破壊検査への応用が考えられる．例えば，安心安全応用の分野では，薬品の指紋スペクトルによる封筒中の違法薬物の非開披検出，文化財保護の分野では，絵画の下地顔料の同定やイメージング，インフラ老朽化検査では，鋼材の塗装膜下の腐食の検出などに，THz 分光の利用が提案されている．

このような THz「指紋」スペクトル構造は，分子構造ではなく，分子間の構造を主に反映しているため，測定対象物が気体か液体か固体かによって，スペクトル形状が異なる．気体では分子の回転が，液体では回転緩和やライブラレーションなどが，固体では分子間振動やフォノンバンドなどが観測され，他の周波数領域の分光よりも分子間構造の違いがドラスティックに現れる．特に結晶性の有機物では，結晶構造を反映した特徴的なピークが観測されるため，分光スペクトルから結晶構造の変化や結晶化度を直接的に求める事ができる．このような THz 分光の利点を化学分野で活かそうとする試みが行われており，例えば製薬分野では結晶多形のモニタリング，高分子分野ではポリマーの高次構造の観測などで，新しいツールとして利用できる可能性がある．

また，THz 分光の特徴として，水に対する感度の高さが挙げられる．THz 帯の水の吸収強度は非常に高いため，微量な水を分光可能である．また，THz 帯の水のスペクトルには，回転緩和や分子間振動，ライブラレーションによる吸収が現れるため，スペクトルから水のダイナミクスに関する情報を得る事が出来る．そのため，THz 分光を用いる事で，高分子の結合水のような微量な水のスペクトルを観測し，そのダイナミクスの解明に役立てる事が可能である．

本講演ではテラヘルツ分光を中心に，テラヘルツ光で何が見えるのかを解説し，テラヘルツ光の化学応用の可能性について議論したい．

- 1) 「赤外線の利用～近赤外からテラヘルツまで」日本化学会編 化学同人，2021 年