

令和元年5月22日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K05381

研究課題名(和文) 分子解離における量子もつれ原子ペア生成ともつれの破れ

研究課題名(英文) The production and breakdown of the entanglement in fragment atoms following molecular dissociation

研究代表者

河内 宣之 (Kouchi, Noriyuki)

東京工業大学・理学院・教授

研究者番号：50161873

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究代表者は、二原子分子の解離により、もつれ原子ペアが生成する可能性を理論的に指摘した。その研究によると、もつれの起源は、もつれ原子ペア状態が保有する対称性にある。したがって、この理論の実験的検証は、きわめて重要な課題である。本研究代表者の理論に依れば、その検証は、原子ペアが放出する光子ペアの角度相関測定により可能である。本研究課題では、水素分子(H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>, 及びHD)の光解離によるLyman- 光子ペアの角度相関関数を測定し、その解析から2p原子ペア状態を同定した。その結果、2p原子ペアは、1重項状態と3重項状態が重なった、もつれ状態にあることが判明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

もつれは、量子力学の根本であり、昨今では、量子計算の資源として盛んに研究が行なわれている。もつれた粒子系を作るためには、高度な制御技術を使用しなければならないと信じられてきた。しかしながら、本研究代表者は、二原子分子が解離すると、それが本来有している対称性のために、もつれた原子ペアが自発的に生成することを理論的に示した。本研究では、水素分子の光解離において、もつれた2p原子ペアが、自発的に生成することを、Lyman- 光子ペアの角度相関測定により実証した。

研究成果の概要(英文)：The principal investigator of this research has theoretically shown that entangled pairs of atoms are produced through dissociation of diatomic molecules. According to the investigation, the entanglement originates from the symmetry properties that the atom-pairs possess. It is hence an interesting subject to identify electronic states of the atom-pairs and to substantiate the production of entangled pairs of fragment atoms, subject which is, according to the investigation, achieved with measuring angular correlation functions of a pair of fluorescence photons emitted by a pair of fragment atoms. In the present research project the angular correlation function of a pair of Lyman- photons emitted by a pair of 2p atoms is measured in photodissociation of hydrogen molecules and the electronic state of 2p atom-pairs is identified, state which turn out to be an entangled superposition between a singlet state and a triplet state.

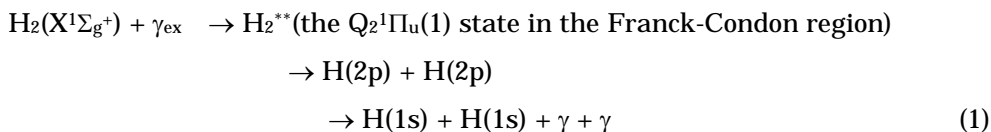
研究分野：反応物理化学

キーワード：もつれ 角度相関 二電子励起状態

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

もつれとは、量子複合系を理解するうえで、鍵となる概念である。十分に離れた複数の部分系から構成される系を考える。もつれ状態とは、全系の状態のうち、各々の部分系の状態を確定できないものをさす。古典論の常識では、全体の状態が定まれば、部分の状態も定まるはずである。したがって、もつれ状態は、量子力学の摩訶不思議さの根源であり、それゆえに、量子情報の資源として、その生成法と操作法に関する研究が盛んに行なわれていた。生成法について言えば、能動的な制御法を駆使する方法がほとんどであった。しかしながら、2007年に本研究代表者らは、分子の光解離により、もつれた原子ペアが生成することを予言した[Ref.1]。その研究によれば、もつれの起源は、原子ペア状態が保有する対称性である。したがって、本研究代表者の理論どおり、分子の光解離によりもつれた原子ペアが、能動的制御法を使用しなくても生成するのか、それとも解離の途上でもつれが破れ、その結果、原子ペアはもつれないのか、を明らかにすることは、きわめて重要な課題であった。本研究代表者らの理論によれば[Ref.1]、この課題達成のためには、解離原子ペアが放出する光子ペアの角度相関測定が有用である。このように、分子解離によるもつれ原子ペア生成の検証実験に向けた機運が調いつつあった。実際、本研究代表者らは、以下に示す水素分子の光解離過程(1)を取り上げ、解離 2p 原子ペアのもつれを検証する実験を試みた[Ref.2]。



ここで、 $\gamma_{\text{ex}}$  は入射光子であり、 $\gamma$  は Lyman- $\alpha$  光子である。本研究代表者らは入射光子エネルギー 33.66eV にて、Lyman- $\alpha$  光子ペアの角度相関関数を測定し、その解析から 2p 原子ペアのもつれを診断しようとした[Ref.2]。しかしながら、角度相関測定における角度範囲が十分ではなく、また角度刻みが広すぎたために、結論を出すには至らなかった。

Ref.1 H. Miyagi et al., J. Phys. B, 40, 617 (2007).

Ref.2 Y. Nakanishi et al., Physical Review A 90, 043405 (2014).

### 2. 研究の目的

以上を背景として、本研究課題では、 $\text{H}_2$  の光解離過程(1)による Lyman- $\alpha$  光子ペアの角度相関関数を上記 Ref.2 よりも広い角度範囲で、より狭い角度刻みで測定し、その解析から 2p 原子ペアの電子状態を同定することを目的とした。状態の同定が実現されれば、光解離過程(1)により生成する 2p 原子ペアがもつれ状態にあるか否かは、すぐに判断できる。また、角度相関測定装置の角度応答特性を実際に測定し、角度相関測定の精度向上を図った。対象分子としては、 $\text{H}_2$  のほかに  $\text{D}_2$  と  $\text{HD}$  を選んだ。 $\text{H}_2$  と  $\text{D}_2$  の比較から、原子核の相対運動が、角度相関関数に与える影響を知ることができる。また同種粒子の不可弁別性の原理から、 $\text{H}_2$  と  $\text{D}_2$  においては、それらの電子状態は、原子核の交換演算子の固有状態でなければならないが、 $\text{HD}$  の電子状態については、そのような制限は課されない。このような観点から  $\text{H}_2$  および  $\text{D}_2$  と  $\text{HD}$  の比較は興味深い。また、角度相関測定に先立ち、Lyman- $\alpha$  光子ペア放出断面積を入射光子エネルギーに対し測定し、その解析から、光解離過程(1)における解離前駆状態が、 $Q_2^1\Pi_u(1)$  状態であることを確定させることにした。

### 3. 研究の方法

図 1 の実験装置を用いて、水素分子の光解離過程(1)に起因する Lyman- $\alpha$  光子ペアの角度相関関数を測定した。入射光は、高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 放射光実験施設より得られる放射光である。入射光子エネルギー 33.66eV の直線偏光を用いた。光子検出器は、マイクロチャンネルプレートと  $\text{MgF}_2$  フィルターで構成される。Lyman- $\alpha$  光子ペアは、図 1 の同時計数システムにより検出・計数される。2 光子同時計数率を装置の角度応答特性で補正し、それを光子検出器の方向に対しプロットすることにより、Lyman- $\alpha$  光子ペアの角度相関関数が測定される。ただし、実測された角度応答特性は、十分に平坦であったので、それによる補正は必要なかった。

実験で得られた角度相関関数を再現するような 2p 原子ペア状態を、包括的に探索した。そのような原子ペア状態が、光解離過程(1)における原子ペア状態である。能率的に探索できるように、2 光子同時計数行列を計算した。

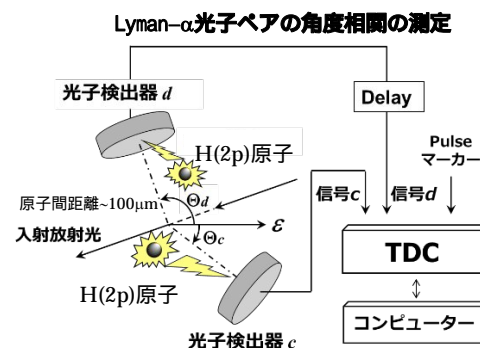


図 1. 実験装置の概要。ε: 入射光の偏光ベクトル。TDC: 時間 - デジタル変換器。

#### 4 . 研究成果

H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>,及び HD に対し、光解離過程(1)に由来する Lyman- $\alpha$ 光子ペアの角度相関計測を実施した。これまでのところ H<sub>2</sub> と D<sub>2</sub> について角度相関関数が確定し、その解析がなされた。H<sub>2</sub> と D<sub>2</sub> に対する角度相関関数は、よく一致した。この実験事実から、原子核の相対運動が、2p 原子ペア状態に与える影響は無視できることが分かった。したがって電子運動の自由度のみを考慮すればよい。このことに基づき、実験で得られた Lyman- $\alpha$ 光子ペアの角度相関関数を再現する 2p 原子ペア状態を包括的に探索した。その結果、過程(1)の 2p 原子ペア状態とは、Q<sub>2</sub><sup>1</sup> $\Pi_u$ (1)状態と Q<sub>2</sub><sup>3</sup> $\Sigma_u^+$ (2)状態が、核間距離無限大で、スピナー軌道相互作用により重なり合った状態であることが判明した。核間距離無限大付近では、これらの状態のポテンシャルエネルギー曲線が極端に接近し、Franck-Condon 領域では無視できるスピナー軌道相互作用が有効となる。この重ね合わせ状態は、もつれ状態であり、このもつれは、解離において不変な 1<sub>u</sub>対称性に由来することが突き止められた。

#### 5 . 主な発表論文等

[雑誌論文](計4件)

- 1) K. Hosaka, Y. Nakanishi, R. Kogo, P. Schmidt, Y. Torizuka, K. Shigemura, T. Odagiri, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, M. Nakano, Y. Kumagai, K. Shiino, M. Kitajima and N. Kouchi  
Angular correlation measurements of a pair of Lyman- $\alpha$  photons emitted in the photodissociation of H<sub>2</sub>,  
J. Phys.: Conf. Ser. **635**, 112016 (2015) 査読あり.
- 2) K. Hosaka, K. Shiino, Y. Nakanishi, T. Odagiri, M. Kitajima, and N. Kouchi  
Dynamics of the Q<sub>2</sub><sup>1</sup> $\Pi_u$ (1) state studied from the isotope effect on the cross sections for the formation of the 2p atom pair in the photoexcitation of H<sub>2</sub> and D<sub>2</sub>,  
Phys. Rev. A **93**, 063423 (2016) 査読あり.
- 3) K. Hosaka, Y. Torizuka, P. Schmidt, T. Odagiri, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, M. Kitajima and N. Kouchi  
The observation of the pair of Lyman- $\alpha$  and Lyman- $\beta$  photons produced in the photodissociation of H<sub>2</sub>,  
J. Phys.: Conf. Ser. **875**, 032002 (2017) 査読あり.
- 4) K. Hosaka, Y. Torizuka, P. Schmidt, A. Knie, A. Ehresmann, T. Odagiri, M. Kitajima, and N. Kouchi  
Breaking space-inversion symmetry in the dynamics of the doubly excited Q<sub>2</sub><sup>1</sup> $\Pi_u$ (1) state of HD,  
Phys. Rev. A **99**, 033423 (2019) 査読あり.

[学会発表](計14件)

- 1) K. Hosaka, Y. Nakanishi, R. Kogo, P. Schmidt, Y. Torizuka, K. Shigemura, T. Odagiri, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, M. Nakano, Y. Kumagai, K. Shiino, M. Kitajima and N. Kouchi  
Angular correlation measurements of a pair of Lyman- $\alpha$  photons emitted in the photodissociation of H<sub>2</sub>  
The 29th International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions, 22 July 2015- 28 July 2015, Toledo, Spain
- 2) 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, 谷内一史, P. Schmidt, 小田切丈, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, 北島昌史, 河内宣之  
H<sub>2</sub> および HD 分子の光解離で生成する Lyman- $\alpha$  光子ペアの角度相関  
第9回分子科学討論会、2015年9月16-19日、東京(東京工業大学大岡山キャンパス)
- 3) 穂坂綱一, 鳥塚祐太郎, 谷内一史, P. Schmidt, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, 小田切丈, 北島昌史, 河内宣之  
水素分子(H<sub>2</sub>,HD, 及び D<sub>2</sub>)の光解離による 2p 原子ペア生成断面積  
量子ビームサイエンスフェスタ, 第33回 PF シンポジウム, 2016年3月15日-16日, つくば市(つくば国際会議場)
- 4) 穂坂綱一, 鳥塚祐太郎, 谷内一史, P. Schmidt, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, 小田切丈, 北島昌史, 河内宣之  
2電子励起水素分子のダイナミクス 2p 原子ペア生成断面積に現れる同位体効果  
日本物理学会, 第71回年会, 2016年3月19日-22日, 仙台市(東北学院大学泉キャンパス)
- 5) K. Hosaka, Y. Torizuka, K. Yachi, P. Schmidt, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, T. Odagiri, M. Kitajima, and N. Kouchi  
Unexpected isotope effect on the cross section of 2p pair formation in the photoexcitation

of H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub> and HD

第 32 回化学反応討論会、2016 年 6 月 1 日-3 日、さいたま市(大宮ソニックシティ)

- 6) 穂坂綱一, 鳥塚祐太郎, P. Schmidt, 谷内一史, 小田切丈, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, 北島昌史, 河内宣之  
2 電子励起水素分子のダイナミクス-H<sub>2</sub>, HD, 及び D<sub>2</sub> からの 2p 原子ペア生成断面積の比較  
第 10 回分子科学討論会 2016、2016 年 9 月 13 日-15 日、神戸市(神戸ファッションマート)
- 7) 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, P. Schmidt, 谷内一史, 小田切丈, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, 北島昌史, 河内宣之  
水素(H<sub>2</sub>, HD, D<sub>2</sub>)の光解離で生成する Lyman-α 光子ペアの角度相関  
第 10 回分子科学討論会 2016、2016 年 9 月 13 日-15 日、神戸市(神戸ファッションマート)
- 8) 河内宣之  
水素の光解離で生成する Lyman-α 光子ペアの角度相関 - 分子の対称性と解離原子ペアのもつれ -  
第 30 回日本放射光学会年会, 放射光科学合同シンポジウム, 2017 年 1 月 7 日-9 日, 神戸市(神戸芸術センター)
- 9) 穂坂綱一, 鳥塚祐太郎, P. Schmidt, 小田切丈, A. Knie, K. Jankala, A. Ehresmann, 北島昌史, 河内宣之  
H<sub>2</sub> の光解離で生成する 2p-3p 原子ペアの観測  
量子ビームサイエンスフェスタ, 第 34 回 PF シンポジウム, 2017 年 3 月 14 日-15 日, つくば市(つくば国際会議場)
- 10) 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, P. Schmidt, 谷内一史, 小田切丈, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, 向後陵子, 北島昌史, 河内宣之  
水素(H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>, HD)の光解離により生成する 2p 原子ペアのもつれと前駆 2 電子励起状態の対称性  
日本物理学会 第 72 回年次大会、2017 年 3 月 17-20 日、豊中市(大阪大学豊中キャンパス)
- 11) N. Kouchi  
Are entangled pairs of fragment atoms produced in the photodissociation of H<sub>2</sub>?  
Workshop on Fundamental Aspects of Quantum Mechanics as They Relate to Atomic, Molecular and Optical (AMO) physics、2017 年 7 月 10 日、東京(上智大学四谷キャンパス)
- 12) 河内宣之  
分子の解離で、もつれ原子ペアが作れるか?  
「弱値・弱測定、エンタングルメント、量子コヒーレンスの新地平」研究会,  
2018 年 2 月 21 日-22 日, つくば市(高エネルギー加速器研究機構 研究本館小林ホール)
- 13) 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, P. Schmidt, 小田切丈, A. Knie, K. Jänkälä, A. Ehresmann, 向後陵子, 北島昌史, 河内宣之  
分子解離でもつれ原子ペアが生まれるか?  
原子衝突学会第 43 回年会、2018 年 10 月 12 日-14 日、宇治市(京都大学宇治キャンパス)
- 14) 穂坂綱一, 鳥塚祐太郎, P. Schmidt, A. Knie, A. Ehresmann, 小田切丈, 北島昌史, 河内宣之  
HD 分子 2 電子励起状態の崩壊過程  
量子ビームサイエンスフェスタ, 第 36 回 PF シンポジウム, 2019 年 3 月 12 日-13 日, つくば市(つくば国際会議場)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

名称:  
発明者:  
権利者:  
種類:  
番号:  
出願年:  
国内外の別:

取得状況 (計 0 件)

名称:  
発明者:  
権利者:

種類：  
番号：  
取得年：  
国内外の別：

〔その他〕  
ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号（8桁）：

### (2) 研究協力者

研究協力者氏名：

ローマ字氏名：

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。