

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 11 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05744

研究課題名(和文) 2電子励起水素分子の対称性と原子ペアのもつれ

研究課題名(英文) Symmetry property and entangled atom-pair formation in the photodissociation of doubly excited hydrogen molecules

研究代表者

穂坂 綱一 (Hosaka, Kouichi)

東京工業大学・理学院・助教

研究者番号：00419855

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)：光解離フラグメントの間には、解離前の分子の対称性を反映した非局所的な相関、“もつれ”の存在が期待される。しかし、水素分子から生成したH(2p)+H(2p)ペア由来の光子ペアの放出角度相関は、予測された“もつれ”状態、混合アンサンブル、それらの線形結合のどれとも異なる状態にあった。本研究では、角度範囲を広げ再測定した放出角度相関と、解離過程におけるスピン軌道相互作用の検討により、光子放出直前の原子ペアの状態を特定した。解離過程における“もつれ”状態の変化を、保存する対称性の観点から明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

“もつれ”は量子力学の核心であり、現在、盛んに研究が行われている量子暗号や量子計算以外にも幅広い領域でブレークスルーを起こす可能性を秘めている。しかし、分子科学においては非局所的な相関、“もつれ”に着目した研究は行われていなかった。本研究により、分子科学の標準的なツールである光解離を用いた“もつれ”フラグメント対生成が明らかになった。今後、分子における“もつれ”の理解が更に進むことで、新しい分子技術に利用されていくことが期待される。

研究成果の概要(英文)：Photofragments are potentially entangled because the symmetry property of precursor molecular states should be succeeded into fragment pairs. However, the entanglement between photofragments has not been verified long time. Experimentally observed angular correlation of two fluorescence photons emitted from H(2p) atoms produced in the photodissociation of hydrogen molecules did not reproduce the theoretical prediction. In the present work, the state of the atom pair has been determined with measuring the angular correlation of two fluorescence photons in a wide angular range and with considering the spin-orbit coupling in the dissociation pathways.

研究分野：物理化学

キーワード：量子もつれ 光解離 水素分子

1. 研究開始当初の背景

(1) “もつれ (エンタングルメント)” とは全体の波動関数が要素の積では表せないことである。近年、“もつれ” を利用した、新しい量子技術が発展している。更に最近では、原子やイオンの時空間制御により、“もつれた”物質を作る技術が進展しつつある。申請者は本研究の開始前、分子の光解離を利用した新しい“もつれ”原子ペア生成の実証実験を行った[Phys. Rev. A. **90**, 043405 (2014)]。

具体的には、図1に示すようにH₂の光解離でH(2*p*)原子ペアを生成した。解離過程で¹Π_u⁺の対称性が保持されれば、磁気量子数 *m*, *m'* が、(*m*+*m'*=±1)の”もつれ”原子対が出来ると期待した。この原子対の *m*, *m'* の”もつれ”は放出される蛍光の偏光相関に転写され、放出角度相関として実験的に評価出来る。しかし、実測した放出角度相関は予測された“もつれ”状態、混合アンサンブル、及び、両者の線形結合のどれとも異なる状態にあった。光解離過程における、“もつれ”喪失過程は知見がなかった。

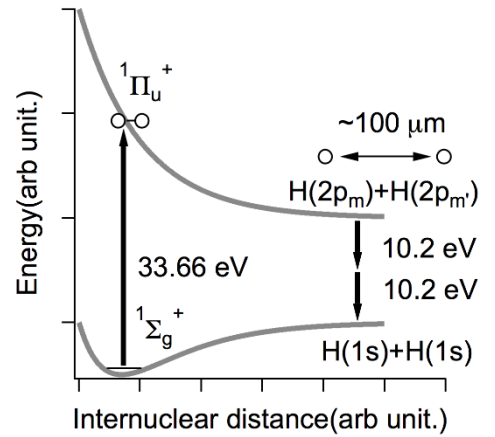


図1 H₂ ¹Π_u⁺状態からの2光子放出過程

(2) 上の問題を解く一つの手がかりとして、申請者はH₂, HD, D₂の2*p*原子ペア生成断面積の大小関係を比較し、HDの解離過程において ungerade 状態から gerade 状態への非断熱遷移を見出した[Phys. Rev. A. **99**, 033423 (2019)]。H₂, D₂においても、Q₂ ¹Π_u(1)状態から非断熱遷移している可能性が大きい。しかし、信頼出来るポテンシャルエネルギー曲線のデータが核間距離の大きい領域では限定されており、具体的な非断熱遷移先は特定できていなかった。また、実測データも不足していた。当時のガスセル[図2]では、放射光軸を中心に、光軸に直交した面(双極子面, 紙面)内を2検出器が独立に回転した。1光子の観測では面内の測定のみで全ての場合を尽くせる(面外の紙面垂直方向はΘ=90度と等価)。しかし、光子が2つになると、検出器2つと偏光ベクトルの3者の関係が問題となる。図2の装置では3者は同一平面内に限定され、状態の特定には任意性が残っていた。

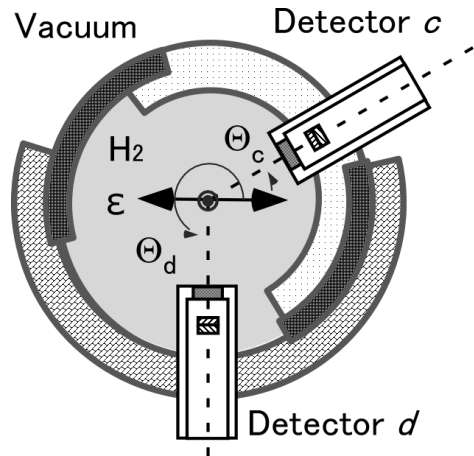


図2 既存のガスセルの概要

2. 研究の目的

光解離片の間には、解離前の分子の対称性を反映した非局所的な相関, ”もつれ”, の存在が期待される。しかし、H₂分子から生成したH(2*p*)+H(2*p*)ペア由来の光子ペアの放出角度相関を実際に測ってみると、予測された“もつれ”状態、混合アンサンブル、それらの線形結合のどれとも異なる状態にあった。本研究では、測定角度範囲を広げた放出角度相関測定による、光子放出直前の原子ペアの状態特定を目的とした。

3. 研究の方法

(1) 実験は高エネルギー加速器研究機構の放射光施設(KEK-PF)で行った。直線偏光した真空紫外光で光励起されたH₂分子は、解離しながら光子2つを放出する。この光子対をそれぞれ別の光子検出器c, dで同時計数測定し、放出角度相関を得た。本研究では、既存のガスセル(図2)に加え、2つの光子検出器が、双極子面から45°外れた位置で回転する新しいガスセルを作成した。

(2) 図3に新作したガスセルの概要を示す。放射光の進行方向から45,135, 225, 315°の4か所に光子検出器a, b, c, dを配置する。これら4つの検出器は一つの平面上にあり、この平面と放射光の偏光ベクトルの相対角 θ は可変である。検出器面内に偏光ベクトルがある配置($\theta=0^\circ$)は、既存のガスセルで計測済みの点と等価であり、この点を用いて、両者の縦軸を共通化した。以上の4台の検出器に加え、更に紙面手前、及び奥側にも光子検出器e, fを設置する。8チャンネルの時間デジタル変換器(TDC)を用い、6検出器間の15通りの組み合わせの同時計測信号を同時に測定する。15通りの組み合わせは図中の5種類(I-V)に分類される。これら物理的に等価な組み合わせの存在は、再現性の確認と統計誤差の減少に利用した。

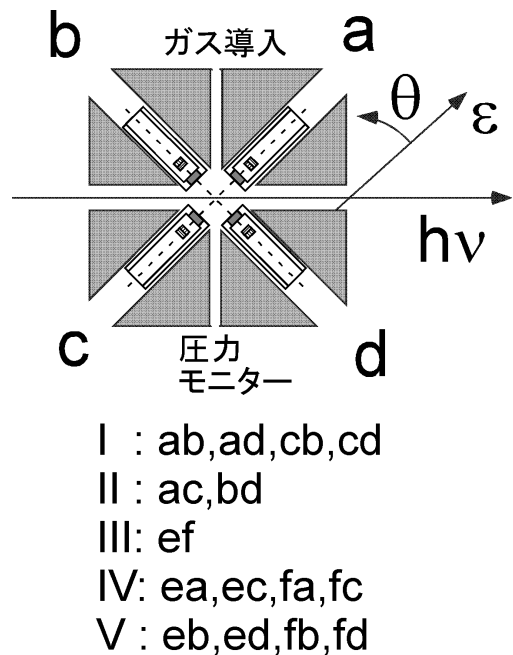


図3 新作したガスセルの概要

(3) 新作したガスセルでは光ビームと検出器の距離が現行のガスセルよりも2倍に離れ、同時計数率は1/16になった。15通りの組み合わせの同時計測信号を全て記録するため、TDCのスタート信号として6つの検出器のうちの1つを使用するのではなく、全6信号のOR信号を使用した。

(4) これまでは、分子領域における対称性から予測される原子ペア状態のみを実験結果と比較していたが、混合アンサンブルを含む任意の原子ペア状態と比較できるように、計算法を見直した。具体的には、原子ペア状態を記述する各基底関数に対し、その項のみから生成する放出角度相関と別の項との干渉により生成する放出角度相関を予め、それらを足し合わせる。足し合わせる際の重みや符号を調整することで、様々な原子ペアの放出角度相関を見通しよく比較できるようになった。

4. 研究成果

(1) 測定角度範囲を広げた放出角度相関測定により、全球面上における光子ペアの放出角度相関を決定した[投稿準備中]。

(2) 放出角度相関計算法の見直しにより、混合アンサンブルを含む任意の原子ペア状態由来の光子ペアの放出角度相関が計算できるようになり[投稿準備中]、解離過程における非断熱相互作用の効果を明らかにした [Phys. Rev. A **99**, 063426 (2019)]。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Torizuka Yutaro, Hosaka Kouichi, Schmidt Philipp, Odagiri Takeshi, Knie Andre, Ehresmann Arno, Kougou Ryoko, Kitajima Masashi, Kouchi Noriyuki	4. 巻 99
2. 論文標題 Entangled pairs of 2p atoms produced in photodissociation of H2 and D2	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 63426
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.99.063426	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hosaka Kouichi, Torizuka Yutaro, Schmidt Philipp, Knie Andre, Ehresmann Arno, Odagiri Takeshi, Kitajima Masashi, Kouchi Noriyuki	4. 巻 99
2. 論文標題 Breaking space-inversion symmetry in the dynamics of the doubly excited Q21 u(1) state of HD	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 33423
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.99.033423	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hosaka K., Torizuka Y., Schmidt P., Odagiri T., Knie A., Jankala K., Ehresmann A., Kitajima M., Kouchi N.	4. 巻 875
2. 論文標題 The observation of the pair of Lyman- and Lyman- photons produced in the photodissociation of H2	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 032002 ~ 032002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/875/4/032002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, Philipp Schmidt, 小田切丈, Andre Knie, Arno Ehresmann, 向後陵子, 北島昌史, 河内宣之
2. 発表標題 もつれ原子ペア生成の実証実験 -水素分子の光解離を例として-
3. 学会等名 第13回分子科学討論会2019福岡
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, Philipp Schmidt, 小田切丈, Andre Knie, Arno Ehresmann, 向後陵子, 北島昌史, 河内宣之
2. 発表標題 もつれ原子ペアの自発的生成 -水素分子の光解離を例として-
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, Philipp Schmidt, 小田切丈, Andre Knie, Arno Ehresmann, 向後陵子, 北島昌史, 河内宣之
2. 発表標題 Are entangled atom-pairs produced in the photodissociation of H2
3. 学会等名 第35回化学反応討論会(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, Philipp Schmidt, 小田切丈, Andre Knie, Kari Jankala, Arno Ehresmann, 向後陵子, 北島昌史, 河内宣之
2. 発表標題 分子解離でもつれ原子ペアが生まれるか?
3. 学会等名 原子衝突学会第43回年会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----