T2R2 東京科学大学 リサーチリポジトリ
Science Tokyo Research Repository

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	エンタングルした原子ペアの分子解離による生成の検証
Title(English)	
著者(和文)	鳥塚祐太郎
Author(English)	Yutaro Torizuka
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第11376号, 授与年月日:2020年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:北島 昌史,大島 康裕,腰原 伸也,西野 智昭,山﨑 優一
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11376号, Conferred date:2020/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	要約
Type(English)	Outline

Powered by T2R2 (Science Tokyo Research Repository)

博士論文の要約
エンタングルした原子ペアの分子解離による生成の検証

東京工業大学大学院　理学院　化学系化学コース
鳥塚祐太郎　（指導教員 ： 北島昌史）
2020年2月

【序論】　量子力学では、全系の波動関数が、それを構成する部分系の波動関数の積で表せないことがある。このような全系の状態をもつれ状態(エンタングルド状態)という。古典論においては、系全体は状態の定まった部分系から構成されるので、もつれ状態は量子力学の非日常性の根源である。もつれは量子情報の資源として盛んに研究されているが、もつれ系の生成には高度な制御技術が必要であると信じられてきた。これに一石を投じたのが、本研究グループの宮城らによる理論予測である[1]。宮城らによれば、水素分子の光解離により生成する H(2p)原子ペアは、もつれ状態にあり、そのことは H(2p)原子ペアが放出する Lyman-α 光子ペアの角度相関測定により実証できる。しかしながら、もつれ原子ペア生成を実証するためのこれまでの研究[2, 3]では、未だ確たる結論を得るに至っていない。そこで本研究では、光解離による自発的なもつれ原子ペア生成の実証を目指し、これまでの研究よりも高精度かつ包括的な実験と、従来無視されてきた相互作用を取り込んだ考察を行った。

もつれ原子ペア生成の実証実験に用いる水素分子の光解離過程を(1)に示す。

$$H_2(X\,{}^1\Sigma_g^+) + \gamma_{ex} \rightarrow H_2^{**}(Q_2\,{}^1\Pi_u(1)) \rightarrow H(2p) + H(2p) \rightarrow H(1s) + H(1s) + \gamma_{Ly\text{-}\alpha} + \gamma_{Ly\text{-}\alpha} \quad (1)$$

ここで γ_{ex} は入射光子を、$\gamma_{Ly\text{-}\alpha}$ は Lyman-α 光子を表す。1 光子吸収により $Q_2\,{}^1\Pi_u(1)$状態に励起した水素分子が中性状態のまま解離すると、H(2p)原子ペアを生成する[4, 5]。各々の H(2p)原子は 1.6 ns の寿命で Lyman-α 光子を放出し脱励起する。H(2p)原子ペア状態は、Lyman-α 光子ペア状態に転写され、その光子ペアの角度相関関数(Angular correlation function, ACF)の測定により、原子ペアの状態が特定される[1]。

宮城らは、解離生成した H(2p)原子ペアが ${}^1\Pi_u$ 状態にあると考え、H(2p)原子ペア状態がもつれ状態となることを予測した。しかし、これまでの実験によって得られた Lyman-α 光子ペアの ACF は、ゆがみ、角度範囲、角度刻みの点で問題を抱えていることを考慮しても、${}^1\Pi_u$ 状態にある H(2p)原子ペア由来の理論的 ACF と一致していない[2, 3]。すなわち、分子解離により、もつれ原子ペアが生成するか否かは未解決の問題である。

本研究はこの未解決問題に解答を与えることを目的としたものである。そのために、従来の部分球面上、すなわちある限定された角度領域における ACF [2, 3]ではなく、全球面上 ACF を測定する。その上で、その ACF を再現する H(2p)原子ペア状態を、あらゆる可能性を排除することなく、包括的に探し出す。そのような H(2p)原子ペア状態が、光解離過程(1)で生じる H(2p)原子ペアの状態である。

【実験】　実験は、KEK-PF BL20A および 28B で行った。光子エネルギー33.66 eV の直線偏光を水素ガスで満たされたガスセルに導き、生成する Lyman-α 光子ペアの同時計数率を 2 つの光子検出器 *c, d* の位置の関数として測定した。検出器 *c, d* の位置は、

それぞれ空間固定座標系(*XYZ* 系)における極角と方位角、(Θ_c, Φ_c)および(Θ_d, Φ_d)、で指定できる(*X* 軸は入射光の波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ 方向、*Z* 軸は偏光ベクトル$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$方向)。本研究では全球面上 ACF を求めるために、過去に 2 つの検出器を設置した入射光の進行方向に直交する面(Dipolar plane (Φ_c=Φ_d=3π/2)) [2, 3]の外にも検出器を設置した。

本研究で、ACF の一般的関数表現を求めたところ、そこには 4 つの角度変数(Θ_c, Φ_c, Θ_d, Φ_d)と 5 つの係数が含まれることがわかった。それら 5 つの係数が一意的に決められるように検出器配置を決定した。ACF が 4 つの角度変数の関数として求まれば、ACF に課される規格化条件から、実測 ACF を絶対値スケールの縦軸に載せることができる。確率密度関数である ACF の規格化条件は、全球面上で積分すると 1 という条件である。

【結果・考察】 本研究で得た実測 ACF を再現する H(2p)原子ペア状態を包括的に探索した。一般に、水素分子はスピン軌道相互作用を無視できるとされてきたが、このことは Franck-Condon 領域では適切であるものの、核間距離が大きくなるにつれ、次第に適切でなくなる。これは複数のポテンシャル曲線が、同一の解離極限に漸近するからである。実際、核間距離の増加とともに、$Q_2\,{}^1\Pi_u(1)$ポテンシャル曲線は、$Q_2\,{}^3\Sigma_u^+(2)$ポテンシャル曲線に、著しく接近する[6]。そのため、スピン軌道相互作用を考慮すると、核間距離の増加に伴い $Q_2\,{}^1\Pi_u(1)$状態は、$Q_2\,{}^3\Sigma_u^+(2)$状態と次第に結合し、核間距離無限大では

$$|\mathbf{1}_u; \boldsymbol{R}\to\infty\rangle = (\mathbf{1}/\sqrt{\mathbf{2}})(|{}^3\boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{u}^+; \boldsymbol{R}\to\infty\rangle|\boldsymbol{\chi}_T^e\rangle - \boldsymbol{e}^{-i\eta_{SO}}|{}^1\boldsymbol{\Pi}_\mathbf{u}; \boldsymbol{R}\to\infty\rangle|\boldsymbol{\chi}_S^e\rangle) \qquad (2)$$

という状態に遷移すると予期される(*R* は核間距離を表し、$|\chi_T^e\rangle$と$|\chi_S^e\rangle$は三重項及び一重項スピン固有状態を表し、η_{SO}は $Q_2\,{}^1\Pi_u(1)$、$Q_2\,{}^3\Sigma_u^+(2)$状態間のスピン軌道相互作用行列要素の位相角である)。そして式(2)の 1_u 状態は、もつれ状態である。フィッティングパラメータを用いずに、物理的な考察によって導かれた 1_u 状態に対する ACF の理論予測は、全ての実測 ACF を概ね再現した。したがって、式(2)の 1_u 状態から予測される ACF は、実験で得られた全球面上 ACF を概ね再現する。以上のことから水素分子の光解離により、もつれ H(2p)原子ペアが生まれていると結論できる。そのもつれ状態は、$Q_2\,{}^1\Pi_u(1)$状態と $Q_2\,{}^3\Sigma_u^+(2)$状態の重ね合わせ 1_u 状態である。

【結論】 以上のように、光解離過程(1)により生じた H(2p)原子ペアは、$Q_2\,{}^1\Pi_u(1)$状態と $Q_2\,{}^3\Sigma_u^+(2)$状態の重ね合わせ 1_u 状態にあると結論される。すなわち、分子の解離によるもつれ原子ペアの自発的生成が実証された。複合系の分割による、もつれの自発的生成は、分子解離に留まらず、一般の系においても起こるであろう。そのもつれ生成の原動力は、系の分裂を通して保存される対称性である。本研究で言えば、解離を通して保存される対称性は、1_u 対称性である。

【参考文献】 [1] H. Miyagi *et al*., *J. Phys. B* **40**, 617 (2007). [2] T. Tanabe *et al*., *Phys. Rev. Lett*. **103**, 173002 (2009). [3] Y. Nakanishi *et al*., *Phys. Rev. A* **90**, 043405 (2014). [4] T. Odagiri *et al*., *J. Phys. B* **37**, 3909 (2004). [5] K. Hosaka *et al*., *Phys. Rev. A* **93**, 063423 (2016). [6] Y. V. Vanne, *et al*., *Phys. Rev. A* **73**, 062706 (2006).