

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

|                   |  |
|-------------------|--|
| 題目(和文)            | 超微細脱分極における分子軸配向分布の可視化およびコヒーレント分布移動法の開発   |
| Title(English)    |  |
| 著者(和文)            | 池田大  |
| Author(English)   | Dai Ikeda  |
| 出典(和文)            | 学位:博士(理学),<br>学位授与機関:東京工業大学,<br>報告番号:甲第12505号,<br>授与年月日:2023年9月22日,<br>学位の種別:課程博士,<br>審査員:大島 康裕,石内 俊一,腰原 伸也,北島 昌史,山崎 優一  |
| Citation(English) | Degree:Doctor (Science),<br>Conferring organization: Tokyo Institute of Technology,<br>Report number:甲第12505号,<br>Conferred date:2023/9/22,<br>Degree Type:Course doctor,<br>Examiner:,,,, |
| 学位種別(和文)          | 博士論文   |
| Category(English) | Doctoral Thesis  |
| 種別(和文)            | 審査の要旨  |
| Type(English)     | Exam Summary   |

(博士課程)

## 論文審査の要旨及び審査員

| 報告番号        | 甲第  |       | 号  | 学位申請者氏名 | 池田 大  |     |
|-------------|-----|-------|----|---------|-------|-----|
| 論文審査<br>審査員 |     | 氏名    | 職名 |         | 氏名    | 職名  |
|             | 主査  | 大島 康裕 | 教授 | 審査員     | 山崎 優一 | 准教授 |
|             | 審査員 | 石内 俊一 | 教授 |         |       |     |
|             |     | 腰原 伸也 | 教授 |         |       |     |
| 北島 昌史       |     | 准教授   |    |         |       |     |

### 論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は、「超微細脱分極における分子軸配向分布の可視化およびコヒーレント分布移動法の開発」と題し、一酸化窒素分子NOの回転運動を対象として、回転ダイナミクスに及ぼす核スピンの影響の精査、ならびに極短パルス光を用いた新規な状態分布制御法の開発について記載したものである。以下に各章の内容を要約する。

第1章では、本論文が2部構成となっており、第I部(第2~6章)では、超短チャープパルス対を用いた高効率励起手法についてまとめ、第II部(第7~第11章)では解離性イオン化を用いた超微細脱分極現象の実時間観測について記載されることを述べている。

第2章では、コヒーレント光により分子の量子状態を制御するコヒーレント制御のこれまでの研究状況について紹介している。その上で、従来法における課題をまとめ、それらを克服する新規コヒーレント分布移動法開発の指針を示している。

第3章では、極短パルス光を用いた分布移動についての理論的考察がまとめられている。実験・理論解析上の優位性からパルス幅と強度をパラメータとするガウス型パルスを用いることが述べられ、また、各パラメータの調整法が検討されている。その上で、光との相互作用後の分子の量子状態分布の算出法として、時間依存のSchrödinger方程式の数値解法について詳述されている。これらの理論的考察に基づいて、周波数チャープによってパルス幅を適当に調整することにより励起先の準位を制御するという独自の方針を提示している。

第4章では、NOの電子基底状態における回転分布制御について、実験手法が具体的に説明されている。特に、光パルスの空間分布ならびに時間プロファイルの測定手法について、詳しい説明がなされている。

第5章では、まず、用いた光パルスの実験的なキャラクターが詳しく説明されている。その上で、高効率分布制御法として2つの手法による結果が紹介されている。第1の手法は、1つ目のパルスによって生成した回転量子波束を2つ目のパルスで干渉させる波束干渉法である。この手法によると始状態  $J=1/2$  から80%以上の効率で  $J=3/2$  に分布移動できることが確認された。第2の手法は、単一パルスでは回転励起が起らないようにパルス幅を伸ばさせたチャープパルスを用いて、適切な相対遅延をつけたパルスペアで励起する二重チャープパルス励起法である。ここでは、第3章に記載の方法に基づいてシミュレーションを行ってパルスパラメータを検討し、その上で  $J=5/2, 7/2, 9/2$  への分布移動効率がそれぞれ85, 70, 15%を達成した実験結果を報告している。さらに、高効率分布移動の物理機構についても考察が加えられており、また、新規分光法としての可能性についても検討が加えられている。

第6章では、第I部の総括と、今後の展望が述べられている。

第7章では、回転ダイナミクスの時空間観測に関するこれまでの研究状況がまとめられている。

第8章では、核スピンの影響による回転ダイナミクスの変調である超微細脱分極の定式化が詳しく論じられている。特に、光励起によって生成した量子波束の時間発展について、球テンソルを用いて簡潔な表式を導出することに成功している。

第9章では、NOの電子励起状態における超微細脱分極の観測について、実験手法が具体的に説明されている。

第10章では、NOの空間分布の時間変化に対する観測結果と、第8章で定式化された理論に基づく解析が詳述されている。特に、実験画像の解析から、初期回転波束に関する密度行列を完全に決定するという成果が報告されている。

第11章では、第II部の総括が述べられている。

第12章では、第I部、第II部をまとめた総括が述べられている。

以上のように、本論文は、極短パルスを利用して単一の量子状態へ高効率で分布を移動する方法論を提案・実証したものであり、また、回転ダイナミクスに及ぼす核スピンの影響を定式化し、画像観測結果の解析へと展開したものである。本成果は、分子の回転量子状態の精密な制御と観測を実現したという点で物理化学研究の上で重要な一歩である。また、振動状態や電子状態の制御など、より広範な領域への展開も期待される。このように本論文は理化学上貢献するところが大きく、博士(理学)の学位論文として十分な価値を有するものと認められる。

注意:「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。