

冷たい分子から何がわかるか： バッファーガス冷却分光法の展開

What can we learn from cold molecules?

Developments in buffer-gas-cooled molecular spectroscopy

岡山大学 宮本 祐樹



私たちが目にする物質や生命現象の多くは、分子の性質によって支えられています。分子は量子力学という自然界の基本法則に従う一方、複数の原子が集まることで多様な形や運動、反応性を獲得し、物質の色、磁性、生体機能などを生み出します。すなわち分子は、原子や電子のミクロな世界と、物質・生命の世界をつなぐ存在です。分子を精密に測ることは、私たちの世界がどのように成り立ち、機能しているのかを読み解く試みといえるでしょう。

分子に光を当て、どの周波数の光を吸収するかを測ると、分子固有のスペクトルが得られます。そこには、分子の形、原子間結合、電子の動き、振動や回転、分子内部で働く相互作用などの情報が刻まれています。しかし、室温の分子は高速で動き、多数の量子状態に分布しているため、スペクトルは複雑に重なり、細かな情報が隠れてしまいます。そこで重要になるのが、分子を気体のまま極低温まで冷やすことです。分子の動きと状態分布を単純化することで、これまで埋もれていた情報を高精度に読み取ることができます。

冷却分子の高精度分光が関わる範囲は、分子科学にとどまりません。ある種の分子は、電子の電気双極子モーメントに代表される極めて小さな対称性の破れに高い感度を持ち、卓上規模の実験から素粒子物理に迫る手段として世界的に研究されています。また、星間空間で観測されたスペクトルを実験室で得たものと照合すれば、宇宙にどのような分子が存在し、単純な分子から複雑な有機分子へとどのように複雑化してきたかを探ることができます。キラル分子の左右差を精密に調べることは、生体分子が一方の鏡像体に偏るホモキラリティーの起源を考える手がかりにもなり得ます。

分子を冷却する有力な方法の一つが、極低温のヘリウムとの衝突を利用するバッファーガス冷却です。私は近年、この方法を用いて、従来は精密分光が難しかった大型分子の冷却と高分解能分光に取り組んできました。その結果、複雑なスペクトルから、分子の構造や電子状態に関する精密な情報を引き出せることが分かってきました。また、得られた結果を量子化学計算と比較することで、理論が複雑な分子をどこまで正しく記述できるかを検証し、計算手法の高度化にも貢献できると考えています。

現在は、バッファーガス冷却分光をさまざまな分子へ応用するための装置開発を進めています。本研究では、分子振動を観測できる赤外領域への展開を目指して、そのための装置開発を進めました。赤外分光からは、分子内の原子がどのように結びつき、分子がどのように振動・変形するかを、より直接的に調べることができます。本講演では、これまでに取り組んできた大型分子の高分解能分光を中心に、分子を冷やすことで何が見えるようになるのかを紹介します。

【キーワード】 冷却分子、精密分光、中赤外分光、分子構造

【参考文献】

- [1] Y. Miyamoto et al. “Analysis on high-resolution spectrum of the S1-S0 transition of free-base phthalocyanine” J. Chem. Phys. 160, 144304 (2024).
- [2] Y. Miyamoto et al. “High-resolution electronic spectroscopy of buffer-gas-cooled metal-phthalocyanines” Low Temp. Phys. 50, 897-901 (2024).