

2016年9月30日

報道関係者各位

慶應義塾大学  
横浜国立大学

## 分子の衝突過程に核スピン依存性を発見 —デュアル・コム分光計の成果—

慶應義塾大学理工学部の佐々田博之教授、岩國加奈訪問研究員は、国立研究開発法人 産業技術総合研究所の稲場肇研究グループ長、大久保章博士、山田耕一博士、大苗敦博士、および横浜国立大学大学院工学研究院の洪鋒雷教授と共同で、分子の衝突過程に核スピン依存性があることを発見しました。

分子を構成する原子の核スピンは、分子同士の衝突過程には影響を与えないと考えられてきました。高性能なデュアル・コム分光計を用いてアセチレン分子( $C_2H_2$ )の多くの吸収スペクトル線を様々な圧力下で精密に調べた結果、2つの水素(H)原子核の核スピンの互いに平行か、反平行かによってスペクトルの線幅が違ふことを世界に先駆けて発見しました。この成果は、分子衝突の基礎理論から、地球や天体の環境を大気スペクトルから推定するモデルにまで影響を与えます。

本研究成果は2016年9月29日〔現地時間〕に米国物理学会誌「Physical Review Letters」のオンライン版でEditors' Suggestionとして公開されました。

本研究はJST戦略的創造研究推進事業 総括実施型研究(ERATO 美濃島知的シンセサイザプロジェクト)の補助を一部受けて行われました。

### 1. 本研究のポイント

- デュアル・コム分光計<sup>\*1</sup>を使ってアセチレン分子( $C_2H_2$ )の水素(H)原子核の核スピンの互いに平行なオルト分子<sup>\*2</sup>と反平行なパラ分子<sup>\*2</sup>で吸収スペクトルの線幅が違ふことを発見

### 2. 研究背景

19世紀はじめ、フラウンホーファーが太陽のスペクトルの中に原子の吸収に由来する多くの暗線を発見して以来、分光学は量子力学の成立、レーザーの発明など科学技術の発展に大きな貢献をしてきました。産業分野で日常的に使われている分光分析装置も、究極の精度を目指す原子時計も分光学に基づいています。

試料気体の圧力が上がると分子間の衝突頻度が増え、吸収スペクトル線の中心周波数がシフトし、線幅が大きくなります。アセチレン分子の吸収スペクトル線は光通信で重要な波長1.5  $\mu m$ 帯の周波数基準として使われるため、試料気体の圧力でスペクトル線がどのように変化するかランプやレーザーを光源にして盛んに研究されてきました。

通常、2つのボールが運動して接触すると衝突したと言います。しかし、2つの分子は、離れたまますれ違ふだけでも分子間に働く電氣的相互作用のため影響しあいます。この過程が分子衝突では重要です。したがって、分子衝突は乱雑な過程ではなく、電氣的相互作用で決まる規則があることが知られています。試料圧力によるスペクトル線の中心周波数のシフトや線幅の増加はこの規則に従います。分子間では電氣的相互作用が核スピンによる磁氣的相互作用よりはるかに大きく、実際にも、衝突過程に核スピン依存性はこれまで観測されてきませんでした。

### 3. 研究内容・成果

図1は研究の内容と成果の概念図を示します。デュアル・コム分光計を用いてアセチレン分子の50本を越す振動回転遷移の吸収スペクトルを6つの試料圧力下で記録しました。これらを解析して各圧力、各振動回転遷移のスペクトル線の中心周波数と圧力による線幅（圧力幅）を決定しました。中心周波数のシフトと圧力幅は圧力によく比例し、それぞれの比例係数を精度良く決定しました。得られた圧力幅の比例係数をみると、オルト分子がパラ分子より圧力幅が最大10%ほど広いことがわかりました。デュアル・コム分光計が、従来の測定方法に比べ波長帯域が広く測定時間が短いため、多数のスペクトル線を均一の条件で記録できた結果、この違いを発見できました。

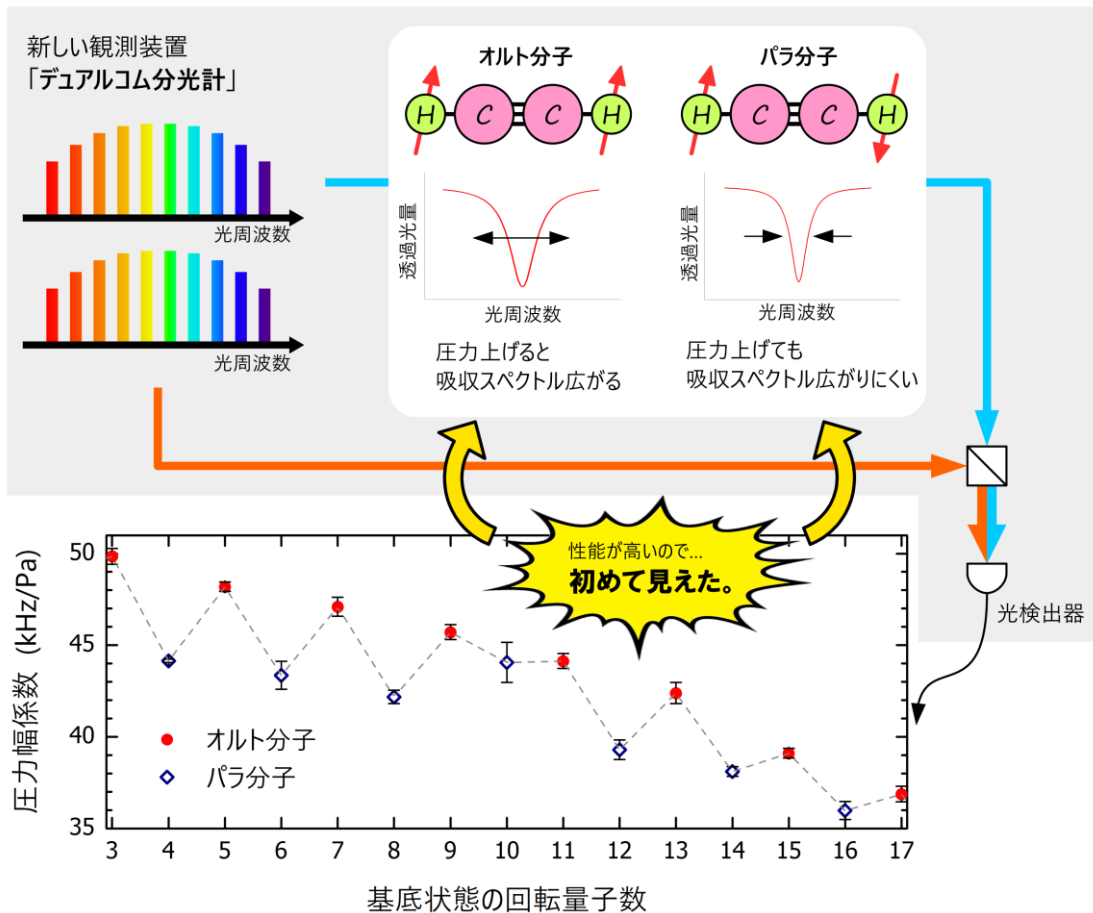


図1 高性能デュアル・コム分光計で発見された圧力幅のオルト-パラ依存性

発見されたオルト分子とパラ分子の差異は、それぞれの数の違いで説明できます。量子統計の効果でオルト分子はパラ分子の3倍だけ存在します。一方、分子衝突で重要な回転共鳴<sup>\*3</sup>は、オルト分子同士、パラ分子同士が衝突するときだけ起きます。したがって、オルト分子の方がパラ分子より同じ核スピン状態の分子と衝突する頻度が高く、圧力幅が大きくなります。

### 4. 今後の展開

水(H<sub>2</sub>O)やアンモニア(NH<sub>3</sub>)など、同種の原子核を2個以上含む分子では同様な効果が観測されると期待されます。デュアル・コム分光計でこれらの分子を調べれば、その衝突過程の詳細を知ることができます。さらに、得られた圧力比例係数を使えば、リモートセンシングで得られたスペクトルから大気環境を推定するモデルを改善できます。

<原論文情報>

タイトル (和訳) : Ortho-Para-Dependent Pressure Effects Observed in the Near Infrared Band of Acetylene by Dual-Comb Spectroscopy (アセチレンの近赤外バンドのデュアル・コム分光により観測された圧力効果のオルト-パラ依存性)

著者名 : 岩國加奈<sup>1,2,3</sup>、大久保章<sup>2,3</sup>、山田耕一<sup>4</sup>、稲場肇<sup>2,3</sup>、大苗敦<sup>2,3</sup>、洪鋒雷<sup>2,3,5</sup>、佐々田博之<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>慶應義塾大学理工学部、<sup>2</sup>産業技術総合研究所物理計測標準研究部門、<sup>3</sup>JST, ERATO 美濃島知的光シンセサイザプロジェクト、<sup>4</sup>産業技術総合研究所環境管理研究部門、<sup>5</sup>横浜国立大学大学院工学研究院

掲載誌 : Physical Review Letters

<用語説明>

※ 1 デュアル・コム分光計 : 間隔周波数のわずかに異なる 2 台の「光コム」を干渉させ、試料のスペクトルを高精度に、かつ高速で取得できる測定装置。光コムは、超短光パルスレーザーから出力される広帯域の楕円状スペクトルを持つ光のことで、これは多数の連続発振レーザーが等周波数間隔で同時に存在しているのと等価である。

※ 2 オルトとパラ : 量子力学では「同種粒子の区別不能性」が要請される。このため、分子の振動回転準位は特定の核スピン状態に限定される。特定の核スピン状態の数が多いものから、オルト、パラと呼ばれる。例えば、振動基底状態のアセチレン分子では、回転量子数が奇数の準位は 2 つの H 原子核の核スピンの平行、偶数の準位は 2 つの H 原子核の核スピンの反平行に限定される。核スピンが平行な状態は 3 つ、核スピンが反平行な状態は 1 つあるので、前者をオルト、後者をパラと呼ぶ。分子の数はこの状態数に比例する。

※ 3 回転共鳴 : 衝突前に回転量子数が  $J$  と  $J'$  の 2 つの分子が衝突後  $J'$  と  $J$  になる過程。衝突前後でエネルギーが保存しているためそれ以外の過程に比べ起こりやすい。

※ご取材の際には、事前に下記までご一報くださいますようお願い申し上げます。

※本リリースは文部科学記者会、科学記者会、各社科学部等に送信させていただいております。

・研究内容についてのお問い合わせ先

慶應義塾大学 理工学部 物理学科 教授 佐々田 博之 (ささだ ひろゆき)

TEL : 045-566-1682 FAX : 045-566-1672 E-mail : sasada@phys.keio.ac.jp

・本リリースの配信元

慶應義塾広報室 (竹内)

TEL : 03-5427-1541 FAX : 03-5441-7640

Email : m-koho@adst.keio.ac.jp <http://www.keio.ac.jp/>

横浜国立大学総務部広報・渉外課 (福田・吉澤)

TEL : 045-339-3016 FAX : 045-339-3179

Email : press@ynu.ac.jp