

四重極シュタルクフィルターのシミュレーション解析

Simulation analysis of Quadrupole Stark Filter

○森 哲也^{1,2} 辻 秀伸¹ 金森 英人¹ 百瀬 孝昌^{1,3}

1.東工大院理工、2.京大院理、3.UBC

Tetsuya MORI^{1,2}, Hidenobu TSUJI¹, Hideto KANAMORI¹, Takamasa MOMOSE^{1,3}

1. Graduate school of Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology

2. Graduate school of Science, Kyoto University

3. The University of British Columbia

In order to reduce interaction-time broadening of ultrahigh resolution spectra, we need to make molecules slower. One of promising cooling techniques is slow molecular selection by using a quadrupole Stark filter^{1,2}. The velocity distribution after the filter is simulated and compared to experimental results¹ of various kinds of molecules. A design for ultrahigh resolution spectroscopy based on multipole guide is proposed.

【序】現在、分子分光学におけるスペクトル線の周波数分解能は、光と分子の相互作用時間によってその測定限界が決まっている。光のビーム径を広げることには限界があるため、相互作用時間を長くするには、分子の並進速度を遅くする、すなわち冷却する必要がある。分子に対する様々な冷却手法の開発が行われている^{1,2,3,4}。その一つである四重極シュタルクフィルター法では、電気四重極ガイドを用い、シュタルク効果による力を分子に与えることで、常温の速度分布を持った分子集団から低速の分子のみを選別している^{1,2}。我々はこの速度選別過程のシミュレーションを行い、実験で得られた選別後の速度分布との比較検討を行った。また、この速度選別を生かした分光測定を想定し、その場合の測定系を設計した。

【シミュレーション】シュタルク効果のハミルトニアンの行列要素は対称コマ分子の基底で書き表すと、以下の式で表される。

$$H_{\text{Stark}} = -\mu E \frac{MK}{J(J+1)} \delta_{K,K'} \delta_{M,M'} \delta_{J,J'} \\ - \mu E \sqrt{\frac{[(J+1)^2 - K^2][(J+1)^2 - M^2]}{(J+1)^2(2J+1)(2J+3)}} \delta_{K,K'} \delta_{M,M'} \delta_{J+1,J'} - \mu E \sqrt{\frac{(J^2 - K^2)(J^2 - M^2)}{J^2(4J^2 - 1)}} \delta_{K,K'} \delta_{M,M'} \delta_{J-1,J'}$$

さらに回転運動のハミルトニアンを加えて対角化することで、シュタルク効果を考慮した回転エネルギー準位が計算される。内部エネルギー温度 300K で分布するすべての回転準位に対して、各 Low-field-seeker 準位の寄与を重ね合わせるにより、実験で得られる速度分布のシミュレーションを行うことができる。

【結果と考察】実験で得られた速度選別後の速度分布と、シミュレーションで得た速度分布とを比較した。一例として、300K で分布するシュタルク分裂した回転準位、約 1 万個を考慮して

得た H_2CO によるシミュレーション結果が図1である。他の分子種についても実験結果と、シミュレーションとの対比を行い考察した。

また、シュタルクフィルターを超高分解能の分光に用いる場合の考察を行った。図2のように、速度選別部の後に分光測定のための1mの直線状の四重極ガイドを置き、その中心にレーザーを通すことにより、その中にある低速の分子集団の分光測定を想定した。こ

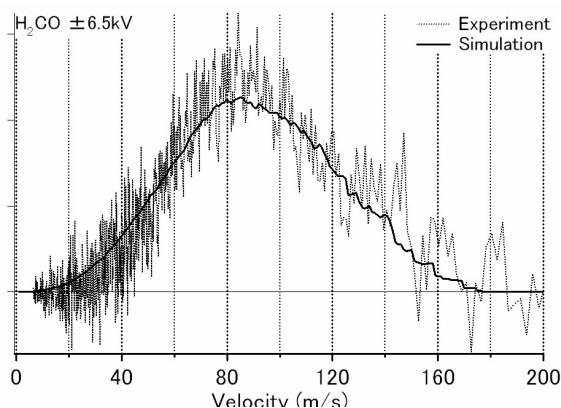


図1. 速度選別後の速度分布とシミュレーション

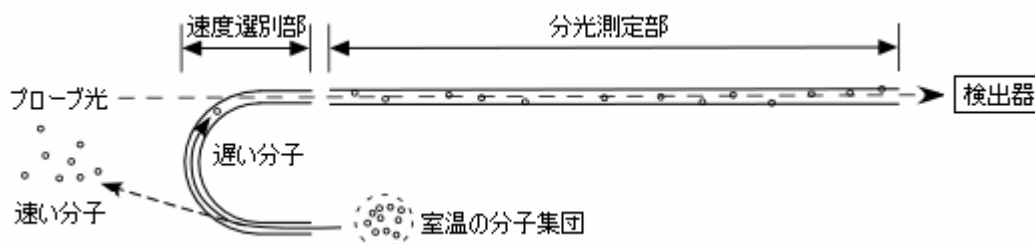


図2.シュタルクフィルターを用いた、分光装置の概略図

のとき問題となるのは、四重極ガイド内の不均一電場によるシュタルク広がりである。この広がりには四重極子ではレーザー径を2mmとすると 1cm^{-1} 程度となり、相互作用時間を長くした意味が全くなくなる。しかし n 重極子 ($n>4$) を用いることで、電場の最大値を変えることなく、光照射の領域を十分に小さな電場の変化にとどめることができる(図3)。例えば十二重極子の場合、低速分子集団の kHz 単位の超高分解能分光が期待できる。

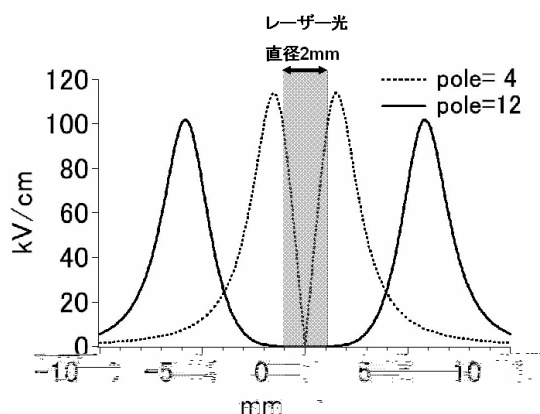


図3. 四重極子と十二重極子のつくる電場の形状

- 1). 辻 秀伸, 森 哲也, 金森 英人, 百瀬 孝昌 分子分光研究会 (2006)
- 2). Cindy I. Hancox, S. Charles Doret, Matthew T. Hummon, Linjiao Luo, and John M. Doyle, *Nature* **431**, 281 (2004)
- 3). T. Rieger, T. Junglen, S. A. Rangwala, P.W. H. Pinkse, and G. Rempe, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 173002 (2005)
- 4). Hendrick L. Bethlem, Floris M. H. Crompvoets, Rienk T. Jongma, Sebastiaan Y. T. van de Meerakker, and Gerard Meijer, *Phys. Rev. A* **65**, 053416 (2002)