

이색 펨토초 레이저 펄스를 이용한 FCN 분자의 배향에 대한 이론적 연구

Theoretical investigation on the orientation of FCN molecules driven by two-color femtosecond laser pulses

윤혁, 김철민*, 김형택*, 이종민*, 남창희

KAIST 물리학과, *광주과학기술원 펨토과학기술연구센터 및 고등광기술연구소
yunhyeok@kaist.ac.kr

본 연구에서는 비공명영역의 파장을 갖는 강력한 이색 펨토초 레이저 펄스를 이용한 극성 분자의 배향을 이론적으로 연구하였다. 분자의 정렬¹⁾과 배향²⁾에 관한 연구를 통해 분자의 반응과 회전 상태를 제어할 수 있으며, 이로써 분자의 방향에 따라 나타나는 독특한 물리적 현상들을 연구할 수 있는 가능성이 생긴다. 일반적으로 선형 분자가 비공명영역의 강력한 레이저장내에 위치하면, 분자 내에 발생하는 유도 쌍극자 모멘트와 레이저장 사이의 상호작용으로 인해 퍼텐셜이 생성된다. 이 퍼텐셜은 분자축과 레이저장의 편광 방향이 이루는 각에 의존하며, 이 퍼텐셜로 인해 분자는 레이저 장의 편광 방향 쪽으로 정렬이 가능하게 된다. FCN 분자와 같은 극성 분자의 경우, 이색 레이저장을 이용하면 정렬뿐만 아니라 배향까지도 가능하다. 레이저장과 이차 조화파로 이루어진 이색 레이저장을 극성 분자에 가하면 분자의 고차 유도 분극도로 인해 발생된 유도 쌍극자 모멘트에 의한 퍼텐셜이 전체 퍼텐셜이 갖는 대칭성을 깨트린다. 이러한 비대칭적인 퍼텐셜로 인하여 분자의 배향이 가능하게 된다. 분자의 정렬 및 배향에 대한 이론적 연구를 위하여, 분자의 회전 운동에 대한 시간 의존 슈뢰딩거 방정식을 수치적으로 계산하였다.

펨토초 레이저 펄스에 의한 분자의 정렬과 배향은 펄스가 사라진 이후에도 반복하여 나타난다. 수치 계산 결과, FCN 분자의 배향은 매우 낮은 회전 온도에서 나타났으며, 이러한 배향의 효과가 분자의 쌍극자 모멘트 중, 고차 유도 분극도에 의한 쌍극자에 의한 것임을 확인하였다. 또한 극성 분자의 배향은 이색 레이저 펄스를 구성하는 두 전기장의 상대 위상에 크게 의존하며, 초기 분자의 회전 온도가 증가함에 따라 배향 정도가 크게 감소하는 특징을 나타냈다. 결론적으로 본 연구를 통하여 매우 낮은 회전 온도를 가지는 극성 분자에 이색 펨토초 레이저 펄스를 가해주면 배향을 실현할 수 있음을 보였다.

1) 분자를 한 방향으로 나란히 세우는 것을 일컬음. 고유 쌍극자 모멘트의 방향은 맞추지 않음.

2) 고유 쌍극자 모멘트의 방향까지 맞추어 정렬하는 것을 일컬음.

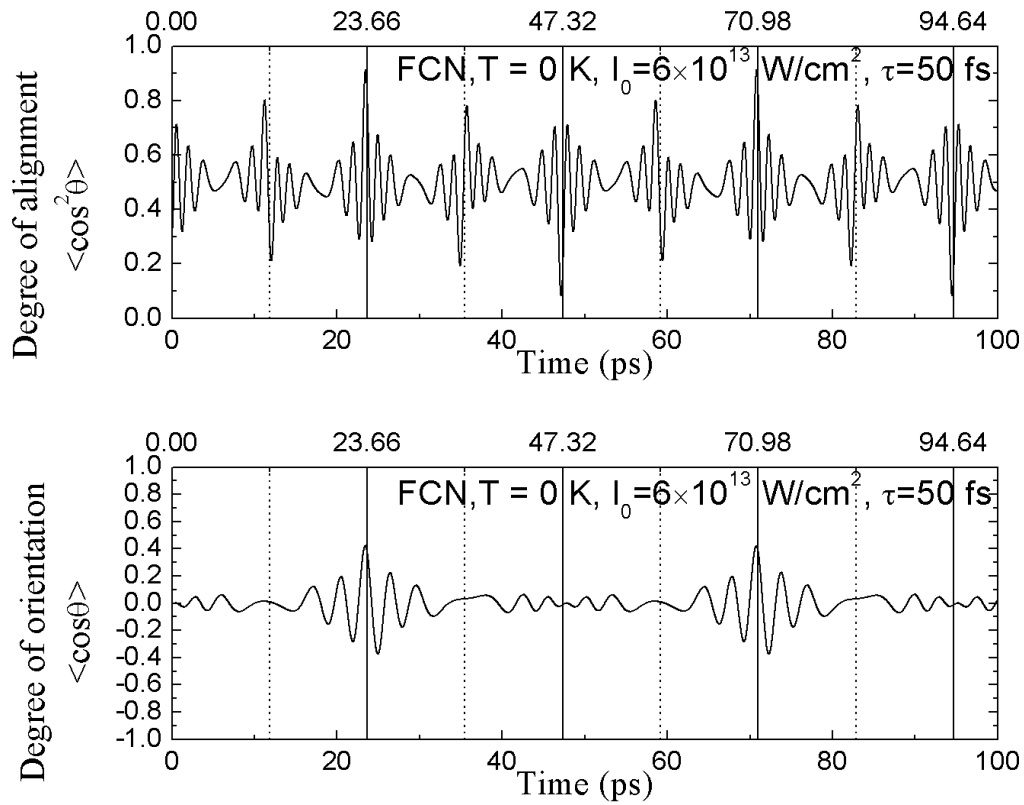


그림 1 시간에 따른 FCN 분자의 정렬도(위)와 배향도(아래). 초기 분자 계의 온도 $T = 0\text{ K}$, 레이저 펄스의 첨두 세기 $I_0 = 6 \times 10^{13}\text{ W/cm}^2$, 펄스폭 $\tau = 50\text{ fs}$.