

3P009

二重試料高分解能赤外発光分光による AlH の振動回転スペクトルの精密な測定

(城西大院・理) 矢部 辰翔, 坂本 幸博, 堀合 公威, 上原 博通

High-resolution infrared emission measurements of spectrum of AlH with dual sample cells

(Josai Univ., Sch. of Sci.) Sinka Yabe, Yukihiro Sakamoto, Kouji Horiai, Hiromichi Uehara

【序】我々が導いた以下の non-Born-Oppenheimer Hamiltonian、

$$H = -B_e(1 + \delta\Delta_B) \frac{d^2}{d\xi'^2} + \frac{B_e(1 + \delta\Delta_B)}{(1 + \xi')^2} \left(1 + \sum_{i=1} \delta r_{iq} \xi'^i \right) J(J + 1) \quad (1)$$
$$+ \frac{[\omega_e(1 + \delta\Delta_\omega)]^2}{4B_e(1 + \delta\Delta_B)} \xi'^2 \left(1 + \sum_{i=1} a_i(1 + \delta\Delta_{aiq}) \xi'^i \right)$$

ここに

$$\xi' = (1 + \delta\Delta_B/2)\xi + \delta\Delta_B/2, \quad (2)$$

によって、TuFIR による精度の高い回転スペクトルを含めて、全ての同位体分子の回転、高分解能振動回転スペクトルの単一 fit ができていることが明らかになっている。本 Hamiltonian は伝統的分子定数に基づいて、物理的意味が明瞭な分子定数と non-Born-Oppenheimer 定数を与える。¹⁾ 解法は解析的である。現在多く行なわれている numerical fit は伝統的分子定数を無視している。

一方において、高分解能フーリエ変換分光器で得られる数多くのスペクトル線は ORIGIN や OPUS で線形 fit を行なうことによって、高精度で中心波数を決定できる。ゆえにこれまで解析がなされている分子であっても、格段に精度の高い情報を新たに得られるものと考え、AlH 分子について検討した。これまで、AlH, $\Delta v=1$ band の詳しい解析は Bernath のグループによって行なわれ、²⁾ $\Delta v=2$ band は我々により観測がなされている。³⁾

【実験】AlH, $\Delta v=1$ band のスペクトルを BRUKER IFS-125HR 分光器により高分解能 (0.018 cm^{-1}) で観測するとともにスペクトル較正を行なった。正確に較正

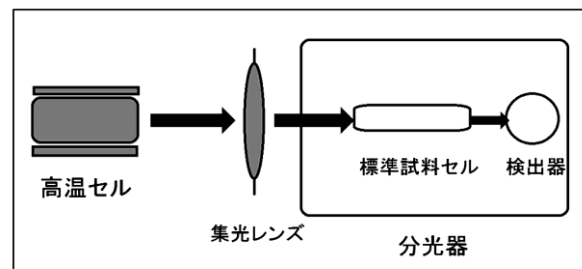


図1. 二重試料観測配置

するためには対象スペクトルと校正スペクトルとが同時に観測される必要がある。AIH, $\Delta\nu=1$ band は 1600 cm^{-1} 近傍にあり、OCS, $00^{0E}2-00^{0E}0$ band で校正した。AIH の試料セル中に波長標準ガスを混入することはできないので、昨年報告した二重光束の配置で観測を行なうことが望ましい。しかし光量が不足しているため、AIH の発光を分光器に導入した後、OCS 標準気体試料セルを通過して検出器に到達する配置で測定した。これを図 1 に示した。AIH の発光スペクトルは H_2 90 hPa を封入した高温試料セル中で AI を 2000°C に加熱することにより得た。分解能 0.018 cm^{-1} 、300 回積算結果を図 2 に示した。

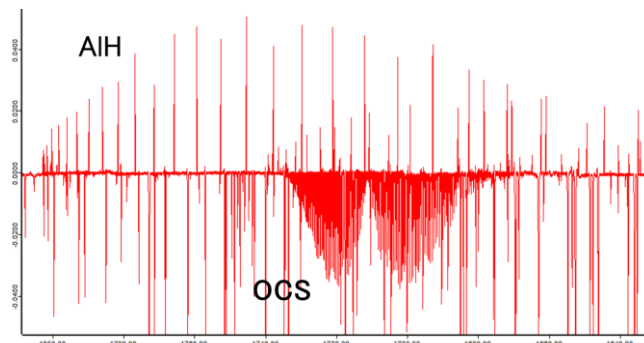


図2, AIH,OCSのスペクトル(分解能 0.018cm^{-1})

【解析・結果】OCS 標準波数は、NIST の Wavenumber Calibration Table を使用した。OCS に対する Obs-Standard を図 3 に示した。校正曲線は直線であり、fit の σ は 0.00021 cm^{-1} である。AIH, OCS のスペクトル波数は全て OPUS の Voigt 線形 fit で決定した。この校正曲線により校正した AIH, $\nu=1-0$ band のスペクトルを White らの報告値²⁾と比較した結果を図 4 に示した。縦軸は我々の値- White らである。補正された値の差は $\pm 0.0005\text{ cm}^{-1}$ 以下に収まり、かつ、バイアスは 0 になっている。今回測定した Data を含め、これまでの AIH, $\Delta\nu=1, 2$ band, AID, $\Delta\nu=1$ band を (1) 式を使って解析した。結果とそれが従来の結果に対して有する利点は当日発表する。

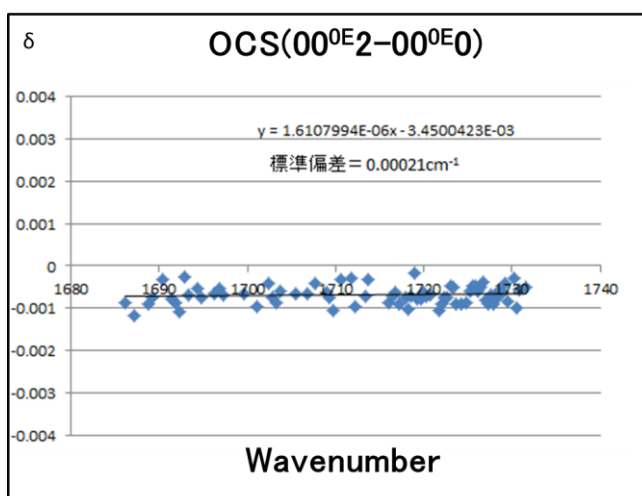


図3, 波長校正曲線

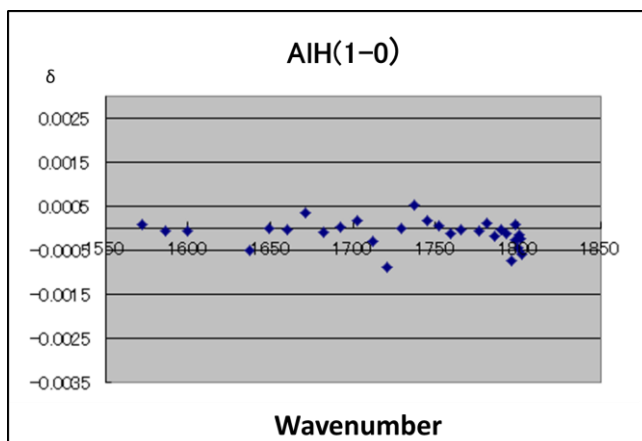


図4, This word-whiteら

1) H. Uehara et al., *J. Phys. Chem. A*, **113**, 10435 (2009).

2) J. B. White et al., *J. Chem. Phys.*, **99**, 8371 (1993).

3) 八木、堀合、上原、分子科学討論会 (名古屋) 2009 年, 2P010