

2P112

CaH分子の $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 吸収遷移の(0,0)バンド回転線の理論強度

(大分大学¹、京都大学花山天文台²) ○本城信光¹、牧田貢²

Theoretical line intensities in $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ absorption (0.0) band of CaH

(Oita Univ.¹, Kyoto Univ. Kwasan Observatory²) ○Nobumitsu Honjou¹, Mitsugu Makita²

【序】 太陽黒点の吸収スペクトルにはCaHなど分子のバンドが観測される。始状態回転準位にある分子数を与えるボルツマン分布則をもとに黒点の温度決定が行われてきた[1]。CaHの $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 吸収電子遷移の(0,0)バンドでは、太陽黒点[1]と実験室[2]のスペクトルとも回転線の強度異常が認められている。この強度異常は $\log(\text{実測回転線吸収強度}/\text{Hönl-London因子})$ が $X^2\Sigma^+$ 始状態の回転項値に対して直線変化しないというものである。

$B^2\Sigma^+$ の断熱ポテンシャル曲線は $D^2\Sigma^+$ と交差回避し二重井戸をもつ[3]。志田ら[4]は二重井戸が回転線強度に及ぼす効果を理論計算で調べた。それによれば、回転振動準位間のフランク-コンドン因子分布において二重井戸の効果が現れる回転量子数は強度異常がおきる領域より大きい。そのため、この効果は強度異常を説明できない。

$B^2\Sigma^+$ と $D^2\Sigma^+$ の交差回避の結果、B-X遷移の電子遷移モーメントは核間距離の変化とともに変動する[5]。これと強度異常との関連を調べるため、我々は電子遷移モーメントの核間距離変化を考慮に入れて回転線の理論強度を計算した。結果をもとにB-X遷移(0,0)バンド回転線の強度への電子遷移モーメントの効果を調べ、強度異常の原因を検討した。

【方法】 B-X吸収遷移(0,0)バンドの $X^2\Sigma^+$ 振動回転始状態(下側状態)の回転量子数を N で表す。回転線 N の吸収強度 W_N を与える式を $W_N = \text{定数} \times S_N \times \exp(-E_N/kT)$ とする。ここで、 E_N は $X^2\Sigma^+$ の回転項値、 k はボルツマン定数、 T は温度である。 S_N は理論強度(光吸収遷移確率)であり、 $S_N \propto \nu_N \times (\mu_N)^2 \times (\text{Hönl-London因子})_N$ とする。 ν_N は遷移エネルギー、 μ_N は遷移行列要素である。

ν_N と μ_N の計算には $X^2\Sigma^+$ と $B^2\Sigma^+$ それぞれの振動回転準位のエネルギーと振動波動関数が必要である。これらは分子回転の遠心力ポテンシャルを考慮に入れた核振動のシュレーディンガー方程式を数値的に解いて決めた。 μ_N は始状態と終状態の振動波動関数と電子遷移モーメントをもとに数値積分で求めた。電子状態の断熱ポテンシャルエネルギーおよび電子遷移モーメントはLeiningerとJeung[5]による非経験的計算結果を用いた。

【結果と考察】(1) $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ バンドの $P(0,0)$ 遷移(選択則 $\Delta N=N'-N=-1$ で許容。 N' は終状態の回転量子数)と $R(0,0)$ 遷移(選択則 $\Delta N=+1$ で許容)のそれぞれについて、遷移行列要素の2乗 $(\mu_N)^2$ が回転量子数 N に対してどう変化するかを調べた。その結果、 $(\mu_N)^2$ 計算値は $P(0,0)$ 遷移で $N\leq 39$ 、 $R(0,0)$ 遷移で $N\leq 37$ においてほとんど一定であることがわかった。実験室で観測されたスペクトル[2]の \log_2 (実測回転線吸収強度/Hönl-London因子)は、全角運動量の量子数 $J=N-1/2$ の場合、 $P_2(0,0)$ は $N=12$ 付近、 $R_2(0,0)$ は $N=16$ 付近で曲がる。これらの強度異常が観測される N 付近で $(\mu_N)^2$ 理論値はほとんど一定である。したがって電子遷移モーメントの核間距離による変化は、実験室で観測されたCaHの $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ 吸収遷移(0,0)バンド[2]における回転線強度異常を説明しない。

(2) $(\mu_N)^2$ 理論値は $P(0,0)$ 遷移で $N> 39$ 、 $R(0,0)$ 遷移で $N> 37$ において急に小さくなる。フランク-コンドン因子も同じ振る舞いをすることから、急に小さくなるのは $B^2\Sigma^+$ ポテンシャル曲線の二重井戸の効果であり、電子遷移モーメントの効果ではない。

(3) 実験スペクトルの回転解析[6]によれば、 $B^2\Sigma^+$ (振動量子数 $v=0$)振動準位は $A^2\Pi$ ($v=1$)振動準位とほとんど同じエネルギーであり、強い摂動がおきる。B状態とA状態の振動準位接近と回転線強度異常との関係を調べることは今後の課題である。

(参考文献)

[1] J.C.Webber, Solar Physics 16 (1971) 340.

[2] G.Liberale, S.Weniger, Physica 41 (1969) 47.

[3] N.Honjou, M.Takagi, M.Makita, K.Ohno, J. Phys. Soc. Japan 50 (1981) 2095.

[4] N.Shida, K.Tanaka, K.Ohno, J. Mol. Spectrosc. 121 (1987) 283.

[5] T.Leininger, Gwang-Hi Jeung, J. Chem. Phys. 103 (1995) 3942.

[6] L.E.Berg, L.Klynning, Phys. Scr. 10 (1974) 331.