3P012

GaH 及び GaD の高分解能赤外発光分光スペクトル

(城西大学院・理) ○伏見 直樹,石塚 雅直,堀合 公威,上原 博通 High resolution infrared emission spectrum of GaH and GaD (Josai Univ, Sch.Sci) ○Fushimi Naoki, Masanao Ishiduka, Koui Horiai, Hiromichi Uehara

【序】

第7回分子科学討論会において、我々は GaH 及び GaD、 $\Delta v = 1$ のスペクトルを測定し、検討を行った。今回新たに InSb 検出器を用いた測定を行い、GaH 及び GaD の $\Delta v = 2$ の高分解能赤外発光ス

ペクトルを観測した。これまでに GaH 及び GaD の Δv = 2の報告はなく、測定した GaH 及び GaD の Δv = 1 のスペクトルを含めて、CO と OCS を用いてスペクトル を正確に較正した。これら4ヶの同位体種の振動回転バ ンドの帰属を行い、各同位体種の Dunham 係数を決定 し、 non-Born-Oppenheimer effective Hamiltonian を用 いて解析を行っている。またスペクトル強度から Harman-Wallis 効果について検討した。



【実験】

Fig.1 二重試料測定系

金属 Ga 40 g をアルミナボートに乗せ、高温試料セルの高温部に置き、水素ガス 133.32 hPa 測定温 度約 1800 ℃で測定した。今回 GaD の測定には約 99.8%の重水素ガスを使用した。Fig.1 に二重試料測

GaD



定系を示した。この系を用いて測定されたスペクト ルは、波数を較正するため NIST の Attars and wave number tables の OCS を用いて行った。波数 較正された GaH・GaD のスペクトルは、強度の強 いピークを選択し、二次のスペクトル標準とした。ま たあらたに、標準試料セルなしでの測定を行った。 この二つの測定におけるスペクトル強度の比は約2 倍であった。GaH・GaD の発光スペクトルの観測 は、分解能 0.015 cm⁻¹ 積算回数で 100 回測定し た。





 cm^{-1}



【結果と考察】

Fig.2 に GaH 倍音の測定したスペクトルの全体図とベースラインを補正した図を示し、Fig.3 に GaD 倍音 の全体図とベースラインを補正した図を示した。Fig.4 には、GaH・GaD 倍音のスペクトル領域の図を示した。 この GaH 及び GaD のピーク位置を読み取り、波数較正し、Loomis-Wood 図を描きスペクトルを帰属を 行った。図5は、GaD 2-0 bandのLoomis-Wood 図で、図6は、GaD 9-7 bandのLoomis-Wood 図で、ある。 中央付近に明確なシリーズが見られる。

確認できたシリーズは⁶⁹GaH で、 v =2-0 ~ 7-5 band まで、⁷¹GaH は v =2-0 ~ 8-6 band まで、同様に GaD についても 帰属を行い

⁶⁹GaDは v=2-0~9-7まで、 ⁷¹GaDは v=2-0~8-6まで観測 することができた。

これらのスペクトルをダナム 展開式に最小二乗 Fitして、 ⁶⁹GaH・⁷¹GaH・⁶⁹GaD・⁷¹GaDの ダナム係数 Y_{ij}を求めた。これら の係数は、倍音スペクトルを合 わせて解析することで、改善さ れた。その結果を Table.1 に示 した。

現在、この帰属データをもと に non-Born- Oppenheimer effective Hamiltonian を用いて 解析を行うと共に スペクトル強 度から Harman-Wallis 効果 については当日発表する。 $Y_{12} \times 10^7$ -0.714(39) -0.105(35) -0.792(16) -0.1051(71) $Y_{12} \times 10^7$ -0.714(39) -0.1588(14) -0.5961(19) -0.1589(26) -0.4890(85) -0.063(12) -0.1429(43) -0.01790(33) -0.14612(83) -0.02095(71) Y_{13} \times 10^7 -0.1172(34) -0.01085(18) -0.11232(85) -0.00971(40) -0.2945(89) -0.0219(18) -0.0219(18) -0.2945(89) -0.0219(18)

表1. GaH 及び GaD の Danham 係数				
Danham係数	⁶⁹ GaH	⁶⁹ GaD	⁷¹ GaH	⁷¹ GaD
Y 10	1603.93657(214)	1143.22789(101)	1603.60662(95)	1142.76972(130)
Y 20	-28.4046(168)	-14.42628(54)	-28.38997(58)	-14.41461(79)
Y ₃₀	0.32137(57)	0.11644(13)	0.32025(16)	0.11629(21)
Y ₄₀	6.1433451(97)	3.1218876(92)	6.1408736(101)	3.1193905(98)
Y 50	-0.1906360(73)	-0.0690056(21)	-0.1905246(39)	-0.0689199(31)
$Y_{01} \times 10^2$	0.27490(34)	0.070937(62)	0.27463(12)	0.07042(10)
$Y_{11} \times 10^3$	-0.359262(28)	-0.093010(17)	-0.359044(31)	-0.0092842(16)
$Y_{21} \times 10^5$	0.8604(15)	0.1598545698(19)	0.8632007056(93)	0.1590694461(33)
Y ₃₁ ×10 ⁷	0.12702(23)	0.017458(93)	0.12736(25)	0.017281(73)
Y ₄₁ ×10 ⁹	-0.1618(10)	-0.02438(70)	-0.1897(72)	-0.0205(12)
Y ₀₂ ×10 ⁴	-0.4370(65)	-0.08127(75)	-0.4329(17)	-0.0785(14)
Y ₁₂ ×10 ⁷	-0.714(39)	-0.105(35)	-0.792(16)	-0.1051(71)
Y ₂₂ ×10 ²	-0.6086(86)	-0.1588(14)	-0.5961(19)	-0.1589(26)
Y ₃₂ ×10 ⁴	-0.433(48)	-0.0707(55)	-0.4890(85)	-0.063(12)
Y ₀₃ ×10 ⁵	-0.1429(43)	-0.01790(33)	-0.14612(83)	-0.02095(71)
Y ₁₃ ×10 ⁷	-0.1172(34)	-0.01085(18)	-0.11232(85)	-0.00971(40)
Y ₂₃ ×10 ¹⁰	-0.340(15)	-0.01644(69)	-0.2945(89)	-0.0219(18)

【参考文献】

1) F. ITO, T.NAKANAGA, H.TAKEO, and H.JONES, J. Mol. Spectrosc., 164, 379(1994).

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

3) J.M. Campbell, M.Dulick, D.Klapastein, J.B.White, and P.F.Bernath, J. Chem. Phys., 99, 8379 (1993).

4)R.Herman, R F Wallis, J.chem.phys.23,637(1955)