

(城西大院理) 堀合公威、上原博通、梅田 秀

【序】高温分子 AIF の赤外分光は、Bernath¹⁾らによって測定され、その解析結果が報告されている。しかし、その報告では、AIF には唯一の安定同位体しか存在しないため Born-Oppenheimer 近似 breakdown を考慮した解析はされていない。そこで、AIF について振動回転スペクトルの Born-Oppenheimer 近似 breakdown を考慮した解析を行うため、フリエ変換赤外分光器を用いて、徹底した測定を行った。その測定において、 1500cm^{-1} 付近に非常に微弱ではあるが $v = 2$ のスペクトルが測定されていた。今回、ダイオードレーザー分光器を用いて、この領域の測定を行い、その測定感度と分解能の有効性の検証を行った。

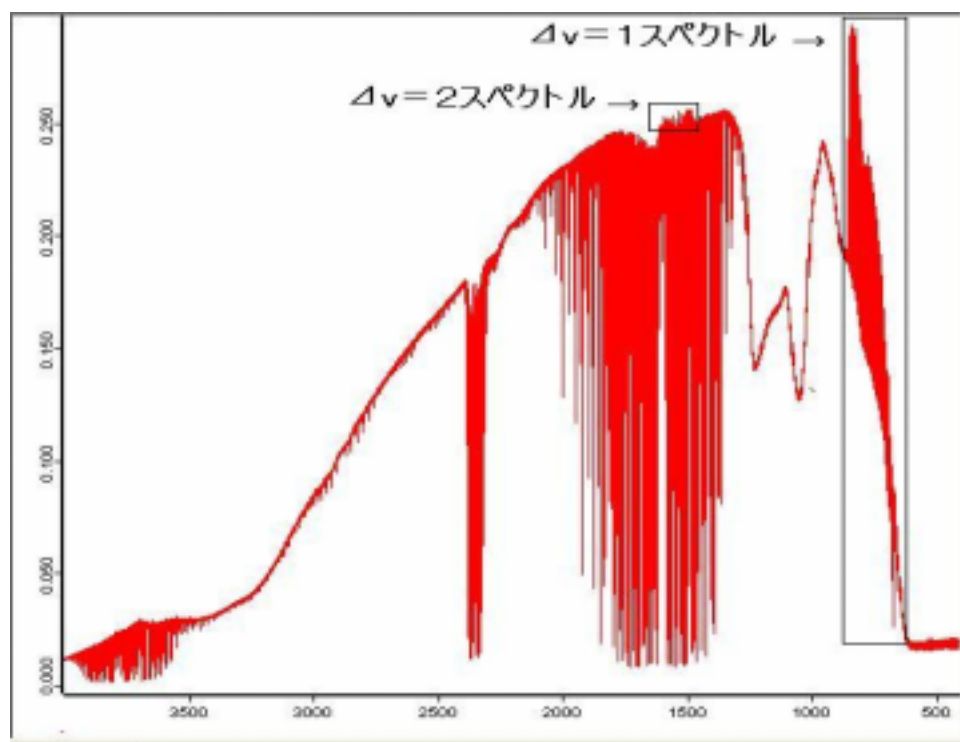


図 1 .Bruker IFS125HR 分光器で測定した AIF の発光スペクトル

【実験】

高温分子 AIF は、 AlF_3 と金属 Al の粉末を高温セル中で $800 \sim 1200$ に加熱して生成させた。このときセル中にはバッファーガスとして Ar ガスを 5hPa 入れた。

測定に用いた分光器は、Spectra Physics SP-5000 で、光源は窒素冷却赤外ダイオードレーザーを用いた。

検出器は窒素冷却 MCT で高温セル

は、シリコニット発熱体で加熱した外径 3cm で長さ 60cm のステンレス管を用いた。測定した領域は、 $1500 \sim 1600\text{cm}^{-1}$ である。

今回測定した領域は、図 1 の Bruker IFS125HR 分光器で測定した AIF の発光スペクトルで示すように、水分子の 2 バンドの吸収領域であり、光路中に圧力幅の非常に強い多くの吸収線が見られていた。また、AIF ($v=2$) 発光スペクトルは、非常に弱かった。従って、本測定は、この水の吸収による妨げが予想され、FTIR の測定を参考に水の吸収が無いが、在っても弱い吸収の領域について行った。

また、この領域には適当な波長標準がないため、我々が FTIR による AIF 測定の解析より求め

た分子定数 (2 0 0 5 分子構造総合討論会 1P141) を用いて計算した値を用いた。

【結果】 AIF($\nu=2$)吸収スペクトルは、今回測定に用いたダイオードレーザーの発振が水の吸収に邪魔をされない領域において約 1 0 0 本測定された。

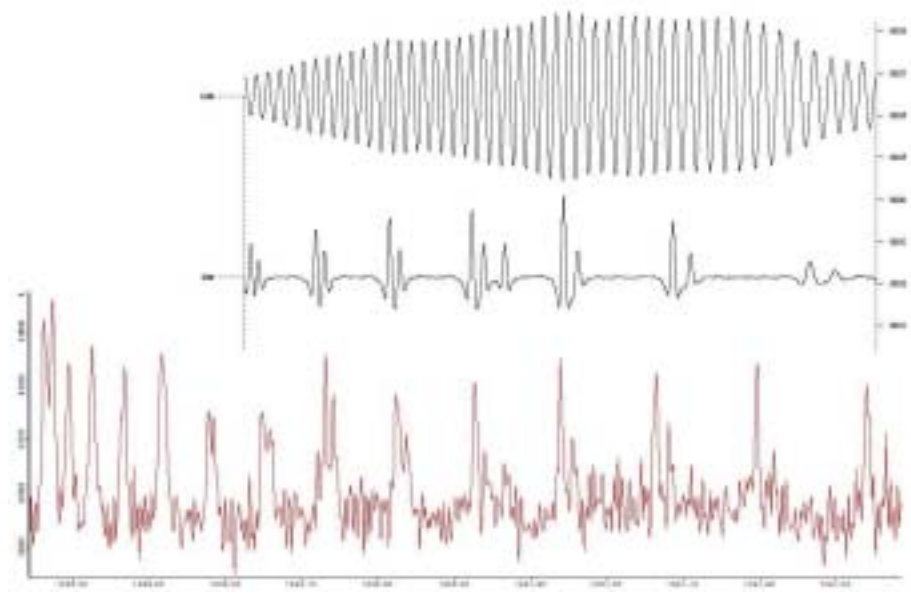


図 2. 1585 cm^{-1} 付近の AIF($\nu=2$)の DL の吸収と FTIR の発光スペクトル

の測定では、S/N も良く、折り返しのスペクトルともよく分離した吸収スペクトルが測定された。



図 3 . 1567 cm^{-1} 付近の AIF($\nu=2$) 4 - 2 バンドのバンドヘッド

例として、図 2 . に 1585 cm^{-1} 付近の FTIR の AIF($\nu=2$) 発光スペクトルとダイオードレーザーの AIF($\nu=2$) 吸収スペクトルを示した。この領域は 3 - 1 バンドのバンドヘッド付近のものであり、FTIR での測定では S/N も悪く、スペクトルも分離が悪かったが、ダイオードレーザー

図 3 に、AIF の 4 - 3 バンドのバンドヘッドのスペクトルを示した。これらのスペクトルは、計算によって求めた波数テーブルと、FTIR での測定で発光の強度が強かったスペクトルを参考にして絶対波数を決定した。

ダイオードレーザースペクトルから決定した $\nu=2$ band の定数と FTIR のスペクトルの解析により決定した分子定数から求めた band の定数の比較については当日発表する。