

ここで○, ●は π 軌道の各炭素原子 p_z 軌道での係数で○は+, ●は一, 丸の大きさは係数の大きさを示す。(I) (II) (III) いずれも Hückel 分子軌道 (HMO) の最高占有軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LOMO) のエネルギーは縮退しているか, あるいはほとんど縮退している。このような系は, 制限 Hartree-Fock 近似で考えると triplet が ground state になる。しかし HOMO と LOMO のエネルギーギャップが小さく電子相関の効果が大きく, 事情は複雑になる。ここでは非制限 Hartree-Fock 近似を用い電子相関の効果を取り入れて計算した。その結果, (I) (III) は singlet が ground state, (II) は triplet が ground state になった。そのスピン構造を図 2 に示す。

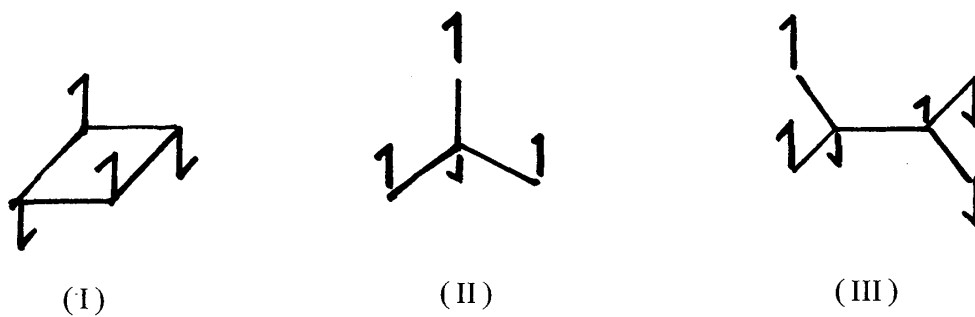


図 2 (↑, ↓は矢印を表わす)

ここで↑の向きと長さはスピン密度のスピン空間での向きと大きさを示す。このように, conjugated Hydrocarbon diradicals の ground state は電子相関の結果 alternating spin structure を持つ状態であることが予想される。

CW 色素レーザーの製作とそれを用いた Na₂A バンドの Polarization 分光

早 川 雅 博

Ar レーザー励起 CW 色素レーザーを製作し, それと他の Ar レーザーを用いて, Na₂A バンドの高振動励起状態 ($v' = 15 \sim 35$) の分光を Polarization spectroscopy の方法によって行なった。

CW 色素レーザーは可視領域で広範囲に波長選択可能なコヒーレント光源として最近

非常に注目されているものである。我々は従来の構成に多少の工夫を加え、自作のより楽なものとした。色素に Rh6G を用い 1W の Ar レーザーで励起した時に 5650～6290 Å で出力約 30mW を得ることができた。また色素に DODCI を少量混ぜることによって 5890～6075 Å で CW モードロック発振させることもできた。

分子に於ける Polarization spectroscopy は最初 Teetsらによって行なわれたもので、¹⁾ 光励起によって生ずる二色性や複屈折を利用したものである。この方法によって複雑な吸収スペクトルを単純化でき、また従来の吸収分光では観測不可能だった弱い吸収線を観測することも可能である。

我々は円偏光した Ar レーザー光を Na_2 に照射することによって基底バンドの特定の振動回転準位に異方性をつくり、この準位からの吸収線の波長で生ずる円偏光二色性等を直交偏光子を用いて、CW 色素レーザーでプローブすることにより、この準位からの吸収線を選択的に観測した。その結果 A バンドの ν' が 15～35 といった高振動励起状態への吸収線を観測できた。この結果を現在知られている ν' が小さい所での分光定数を外挿して計算した値と比較することにより、高振動励起状態に於ける実測値と計算値の差の回転量子数 (J') 依存性の傾向をつかむことができた。

参 考 文 献

- 1) R. Teets et al., Phys. Rev. Lett. 37, 683 (1976).

$\text{AgNa}(\text{NO}_2)_2$ の光スペクトル

萩 行 正 憲

$\text{AgNa}(\text{NO}_2)_2$ は、 NaNO_2 と類似の結晶構造をもち、 38°C を転移点とする order-disorder 型の強誘電体である。この結晶の光スペクトルは、 NO_2^- 基に関係した振動微細構造を示す等興味ある特徴を有する。本研究では、 Ag^+ イオンによる enhancement を受けるとされている三重項吸収及びラマンスペクトルが、相転移によってどのような影響を受けるかを調べる目的で、これらのスペクトルの温度変化を測定した。