

Title	塩素原子を含む気体分子の内殻吸収スペクトル(東京大学教養学部 相関理化学専門課程,1978年度 修士論文)
Author(s)	二宮, 健
Citation	物性研究 (1979), 32(1): 75-79
Issue Date	1979-04-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/89769">http://hdl.handle.net/2433/89769</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

ならない。よって  $N_2$  laser 励起によって発光する発光線のうちで最大強度を示す発光線は、自由励起子発光の side band 以外のものであると考えられる。同様の現象は  $x=0.1$ ,  $0.3$  にも見られ、特に  $x=0.3$  では NP + LO のピーク値と比較して分解能から考えても有意な差が存在している。それぞれの混晶における  $N_2$  レーザー励起の最大強度の発光線を図 1 中で M として示してある。さてこの M 線の励起強度依存性及び寿命を測定したが  $x=0.2$  の時 M の強度は励起強度の 1.4 乗に比例し寿命は 7n sec となる。(他の side band では 1.02 乗に比例し、寿命は 10 n sec) 他の混晶でも同様なことが見られ、以上の考察により M は NP + LO 以外の起源によるもので、 $N_2$  レーザーの高密度励起による励起子分子に起因する発光線と考えるのが妥当であろう。

### 参 考 文 献

- 1) Baba et al, Il Nouvo, 39B, 609, (1977)
- 2) Kanzaki et al, Sol. State Commun. 9, 999 (1971)
- 3) Bootz et al, Phy. Stat. Sol. (b) 66, 169 (1974)

## 塩素原子を含む気体分子の内殻吸収スペクトル

二 宮 健

I. 序 塩素原子を含む気体分子の  $Cl L_{2,3}$  吸収スペクトル ( $h\nu=200$  eV 付近に現われる) の測定は Hayes, Brown, Glushkin らによって行なわれたが、分解能、吸収断面積の絶対値あるいは各構造の帰属は未だ十分あきらかではない。また、塩素は比較的大きな原子であることから、HCl と  $Cl_2$  の Cl  $L_{2,3}$  イオン化エネルギー付近、特に電離連続帯でのそれぞれの吸収スペクトルを比較することにより、分子中での Cl 2p 殻からの励起電子に対する分子場の効果についての知見が得られることが期待されるが、 $L_{2,3}$  領域から  $L_1$  領域にかけての電離連続帯での Cl L 吸収スペクトルの測定例はない。また、 $B Cl_3$  については、B の K 吸収スペクトルから  $Cl_3$  荷電子の形成する barrier の効果に関するより詳しい情報が得られると思われ、さらに、B の K 吸収スペクトルと Cl の  $L_{2,3}$  吸収スペクトルがほぼ同じエネルギー領域に現われる可能性があることから、2つの原子の励起状態間の相互作用も観測されると期待できる。

二宮 健

本研究では、これら HCl, Cl<sub>2</sub>, BCl<sub>3</sub> の3つの気体試料について、

1) 吸収断面積の決定、リードベルグ・シリーズの解析および電離連続帯での吸収断面積の挙動を知ること

2) これらの結果から、3つの分子の内殻励起状態について情報を得ること

を目的として、各々の Cl L (BCl<sub>3</sub> については L<sub>2,3</sub> のみ) 吸収スペクトルの測定、および B の K 吸収スペクトルの測定を行なった。また、さらに、リードベルグ・シリーズの解析のため、分子軌道法を用いた励起状態の非経験的理論計算も行なった。

Ⅱ. 実験 分光用光源としては東大物性研 400MeV SOR-RING からのシンクロトロン軌道放射光を用いた。使用した分光器は 2m 変型ポダール型斜入射分光器で、分解能は  $h\nu = 200\text{eV}$  付近で  $\Delta E = 0.07\text{eV}$  程度であった。試料気体がいずれも腐食性であったりあるいは人体や光学素子などに対し有害であるため、テフロン製気体吸収セルを製作し、気体試料をこのセルに封じ込め、これを通しての透過光の強度を測定することで透過率 ( $T$ ) および吸収係数 ( $\alpha$ ) を求めた。各試料について数個の異なった試料圧 ( $p$ ) ( $0.1\text{Torr} < p < 5\text{Torr}$ ) で測定を行ない、波長を固定した時  $p$  と  $\alpha$  が比例関係にあることから、最小2乗法を用いてこの直線の傾きを求め、この傾きから吸収断面積を計算した。

Ⅲ. 結果・考察 Fig.1 ~ Fig.5 に得られた吸収スペクトルを示す。イオン化エネルギーから低エネルギー側に現われる構造についての図中の帰属 (Fig.2, Fig.4) は、対応する分子中の Cl 2p 電子の内殻励起状態の理論計算結果と測定された吸収スペクトルとの比較から求められた。この結果、どちらの分子についても、反結合性軌道への遷移による broad な band の後ろからリードベルグ・シリーズが始まることが分かった。リードベルグ状態は、その励起エネルギー  $E_{\text{ex}}$  が  $E_{\text{ex}} = I_p - R/(n-\delta)^2$  でよく近似される状態である。求められた quantum defect  $\delta$  とイオン化エネルギー  $I_p$  を用いて、各シリーズの励起エネルギーの計算値と実測値とを比較すると、HCl では大体において 0.01eV の範囲で一致しており、また、各シリーズの quantum defect やスピン軌道分裂のエネルギーも妥当な値であることから、この帰属ではほぼ間違いないと思われる。一方、Cl<sub>2</sub> では、どのような帰属をとってみても HCl ほどには計算値と実測値は一致しない (0.06 eV ~ 0.2 eV の差がある) ことなどから、HCl のように単純にその励起状態がリードベルグ状態であるとはいえない可能性もあろう。

また、両者の吸収スペクトルを比較すると、HCl では Cl<sub>2</sub> に比べ 2p → 4p の遷移が

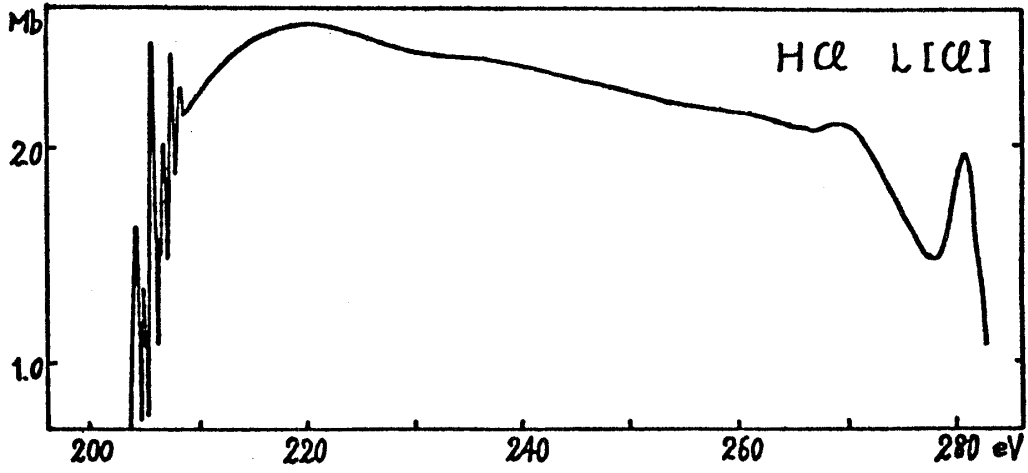


図 1.

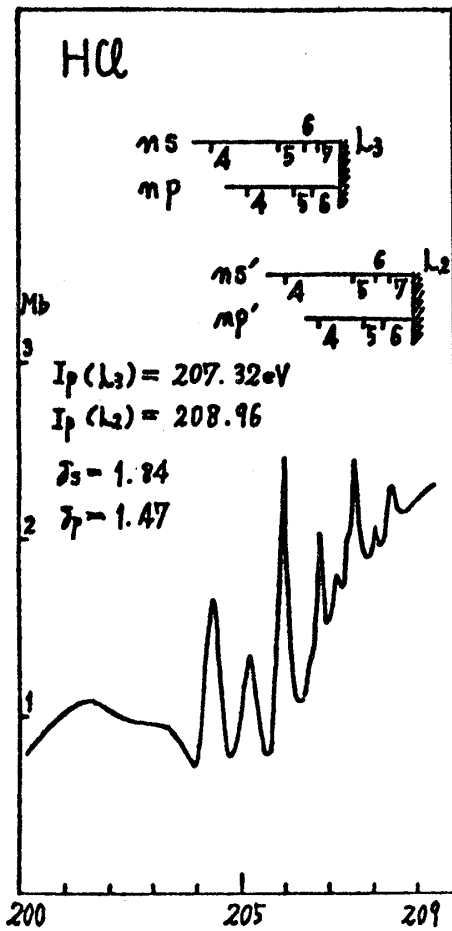


図 2.

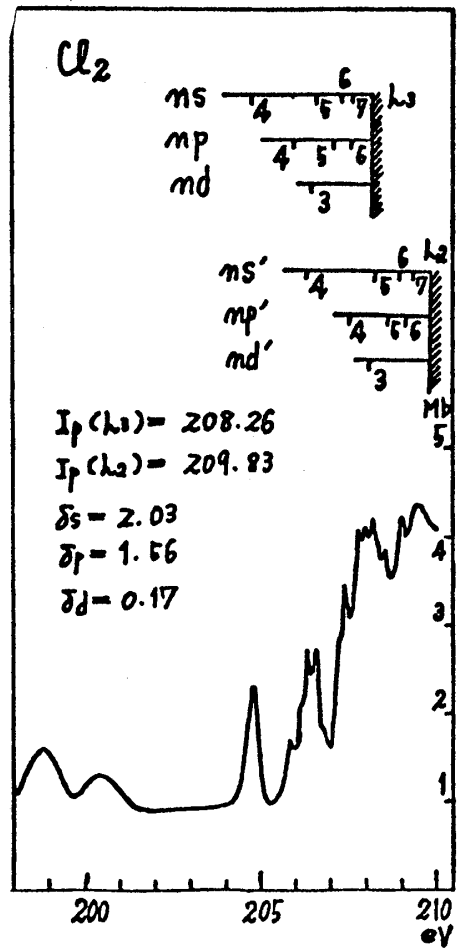


図 4.

(注) 図の縦軸はすべて吸収断面積

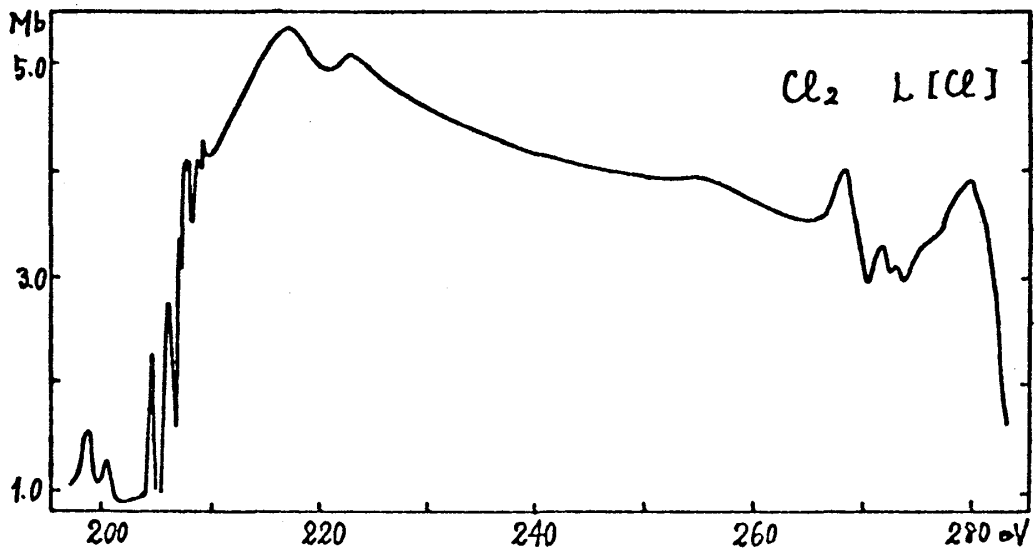


図 3.

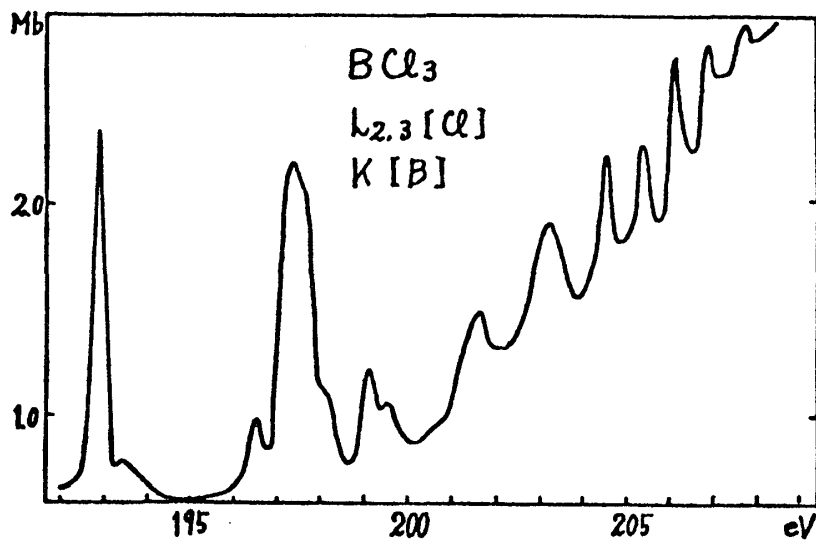


図 5.

(注) 図の縦軸はすべて吸収断面積

かなり強くなっており、このことは理論計算結果によっても確かめられた。これは、Cl  $2p$  殻からの励起電子の感ずるポテンシャルが、HCl では  $\text{Cl}_2$  に比べより球対称からはずんでいることを反映しているものである。

さらに、 $\text{Cl}_2$  ではイオン化エネルギーより高エネルギー側電離連続帯の中に broad な共鳴構造が観測された。この構造の可能性としては中心カバリアー効果による shape resonance が有力なのではないかと考えている。その理由としては、 $\text{N}_2$  の K 吸収にも同様の構造が見られること、あるいは、HCl では対応する領域に同様の構造が見られないこと（H の励起電子に対する散乱効果が弱い）などがあげられよう。

一方、 $\text{BCl}_3$  吸収スペクトルについては、200 eV から高エネルギー側の周期的構造は Cl のリードベルグ・シリーズとして説明をつけることができるが、これより低エネルギー側の構造（おそらく B の K 吸収）については、 $\text{BF}_3$  の B の K 吸収スペクトルからの類推により、B のリードベルグ・シリーズは予想できるものの、それ以外については説明のつけにくい箇所が多い。なお、 $\text{BCl}_3$  の分子軌道計算は現在実行中であり、計算結果が出れば、各構造に説明をつけることができると期待している。

## リン酸塩のリン P の $L_{2,3}$ 吸収帯

藤 間 一 美

目的 放射線の照射による生物の遺伝情報の伝達機能をもつ核酸分子の失活の初期過程で、リン酸中のリンの L 殻の電子による光子のエネルギー吸収が大きな役割を果していると予想される。この研究の第一の目的は、リン酸中のリンの吸収係数を定量的に知り、その初期過程のおこる確率を定量的に把握することである。

第二の目的は、この吸収スペクトルに現れる大きな4つの吸収の山は、リン酸分子に固有なものであり、リン酸基の外側の影響は強く受けないと予想されるが、この事実を確かめ、4つの吸収の山の起源を明らかにしようとするものである。

実験 測定した試料はリン酸の無機塩 ( $\text{LiH}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{NaH}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  および  $\text{NH}_3\text{PO}_4$ ) とヌクレオチド（チミジル酸）である。これらの試料について光電子収量スペクトルと透過スペクトルを観測した。このリンの L 殻の電子の励起のような深い内