

る。この際、上記レーザーとしては、その光子エネルギーは禁制帯エネルギーよりも小さいものを選び、PLに帯間発光が混在するのを防いでいる。まず、ラマン散乱の測定を試みて、838 nm 発振波長の小出力レーザー（15 mW）ながら、その検出に有効であることを認めた。

次に、1.34 eVにみられるPLが20 Kでは、ホノンレプリカ（35 meV）を示すことを測定し、不純物Cu<sup>-</sup>イオンに由来することを明らかにした。最後に、発振波長838 nm AlGaAs 半導体レーザーによるPLが、1.06 μmのNd:YAGレーザーの照射により減少（ホトクエンチングを起こす）すること、およびYAGレーザーの照射の中止によりEL2のPLの回復とともにCu<sup>-</sup>イオンのPLが一時的に上昇し、その後約2分の時定数で復帰することを認め、これらの時間変化の定性的な解釈を行っている。この研究は一方では、AlGaAs 半導体レーザーがGaAsの深い準位の励起光源としての有用性をはじめて示したものである。

## 2. 高温作動型熱接触電離イオン源の試作

岩 永 俊 之

本論文は、熱接触電離機構を利用したイオンビーム源の開発研究にかかわるものである。当研究室では昭和48年より小型の熱接触電離型イオンビーム源の開発研究を行なって来ている。本研究に於いては、多様なイオンの生成の可能性を広げ、更に出カイオン電流を増す事を目的として、作動温度の高温化とイオン源部の大口徑化がはかられた。

上記目的達成の為、構造は全体的に改良された。特にイオン源部に対しては、保護用のタングステン円筒（外径7 mm、内径5 mm、長さ20 mm）の内面に沿って挿入された、高融点、高仕事関数金属であるレニウム（仕事関数4.96 eV）箔製円筒の内面での熱接触電離を利用する、新しい構造が提案されている。イオン源材料物質は、溜めで蒸気化され、イオン化部の支持具を兼ねる導管を通してレニウム円筒の内面に向けて噴出される。生成されたイオンは他端から引き出され、加速、収束されビーム化される。この構造により、従来のも（内径2 mm）に比較して大口徑化と高温化が格段と容易になっている。

更に、従来からのタングステンフィラメントの輻射による加熱に加えて、新たに、同フィラメントを陰極とする電子衝撃加熱を併用する事によって、作行温度としては従来1950 Kから大幅に上げられ、約3000 Kでの使用を

可能にした。この温度は、レニウム<sup>93</sup>の融点が3453 Kであることを勘案すれば、ほぼ物性による限界点であろうと考えられる。

生成イオン種の同定は飛行時間法による質量分析器を制作し、これを用いて<sup>6</sup>Li<sup>+</sup>と<sup>7</sup>Li<sup>+</sup>の同位体の識別を行なった。

更に、LiCl及び金属Liをイオン源物質としてイオン生成の性能試験を行なっている。LiClでは、イオン源温度2900 Kに於いてLi<sup>+</sup>イオン260  $\mu$ A、金属Liでは同じ条件で310  $\mu$ Aを得、従来の物の約10倍の値を実現している。

### 3. 有機化合物(C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>NOS)のab-initio 計算における基底関数の選択について

岡 本 朗

1970年代J. A. Pople等が、プログラムGaussian 70を公表してから、分子に関するab-initio計算は急速な発展を遂げその変分計算の基礎となる基底関数についてその最良のものを得るための努力が積み重ねられた。しかしながら複雑な基底関数を用いた計算では計算機のファイル容量によって適用される分子の大きさにかなり制限が加わることは避けがたい。そこで本論文においては特にC<sub>7</sub>H<sub>5</sub>NOS分子を例題として分子内の基底関数の精度を安定なベンゼン環と、それ以外に分ける事によってab-initio計算をできるだけ大きな分子に適用することを試みた。

実際には、D軌道を入れることによりN-S間Populationが約360倍になり、さらにベンゼン環に3-21 G基底関数を、残りに6-31 G基底関数+酸素に結合した炭素、窒素そして硫黄にD軌道を入れると約490倍にもなっている。なおかつベンゼンに6-31 G基底関数を用いて計算したときに比ベータルエネルギーは約0.15(%)しか下がっておらず、近似が十分に満足いく結果が出ている。加えてファイル容量は約95(%)に減少しておりCPUタイムも約85(%)に減少しているので、分割方法及びD軌道の導入は有効であるといえる。