

NO の微分断面積と一般化振動子強度の測定

山田千樫研究室 杉崎 剛

・ 実験の目的

私たちの研究室では昨年までに 500eV での一般化振動子強度(GOS)を得ている。そこで、電子の衝突エネルギーを変えて実験を行い、昨年までの実験結果と比較する。

・ GOS の定義

$$F_{0\alpha} = \frac{2mE_{\alpha}}{K^2\eta^2} |\langle \epsilon_{0\alpha} \rangle|^2 \quad \langle \epsilon_{0\alpha} \rangle = \int \phi_0^*(\mathbf{r}_a) \left\{ \sum_j \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j) \right\} \phi_{\alpha}(\mathbf{r}_a) d\mathbf{r}_a$$

基底状態から 状態へ励起したときの GOS を $F_{0\alpha}$ と書くと

で定義される無次元の量で、 K^2 にのみ依存する関数である。

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_{\alpha} \quad K^2 = k_0^2 + k_{\alpha}^2 - 2k_0k_{\alpha} \cos\theta$$

・ GOS の実験による決定方法

電子エネルギー損失分光法(EELS)によって NO のスペクトルを測定し、弾性散乱と非弾性散乱の比を取ることで相対微分断面積を得る。そして、相対微分断面積を相対一般化振動子強度(RGOS)に変換して、光学的振動子強度を規格化する事により GOS を得る。

・ 散乱角の決定

散乱角の精度は測定値に大きく影響する為、散乱角 0deg を He の 2^1S と 2^1P の散乱強度比 $2^1S/2^1P$ の対称性から決定し、実験装置の読みの角度と実際の物理的な角度の対応は He の既知の $2^1S/2^1P$ の値から決定した。

・ 実験によって得られたスペクトル

例として、以下の条件で測定された電子エネルギー損失スペクトルを図 1 に示す。

試料	NO ガス
衝突エネルギー	400eV
散乱角度	7.1deg
電子電流	6.5nA(2.1deg で測定)
ガス圧	4.2×10^{-5} Torr
測定時間	約 6 時間

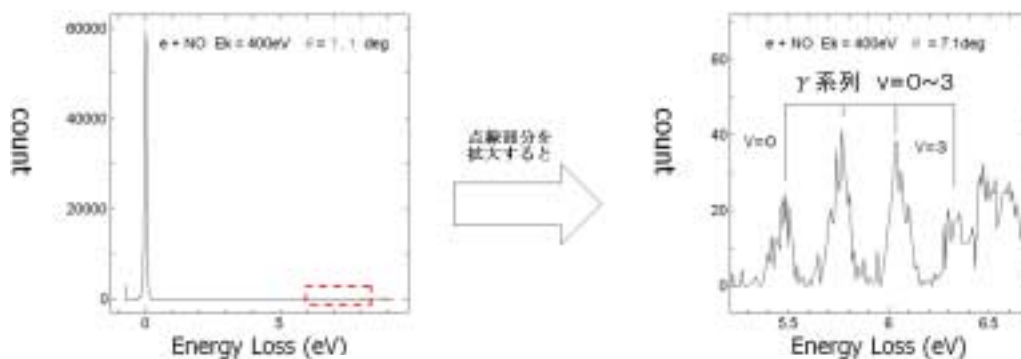


図1 EELSによるスペクトル

・ データの解析の手順

ノイズの処理

ノイズは確実にピークの存在しない 2eV ~ 4.5eV で 1ch 当たりのノイズの平均を計算し、全ての範囲で引いた。

ガウシアン関数の当てはめ

系列 v=3 など、ピークによっては隣のピークと重なってしまい、単独でのピーク強度を求めることが困難であるので、ガウシアン関数を当てはめ、その積分した値をピークの強度とした。

角度補正因子

標的圧力、電子電流等を同じ条件にして N₂ の弾性散乱の角度分布を測定し、文献値との比較により角度補正因子 h() を決定した。

相対微分断面積

弾性散乱と非弾性散乱の比を取り、それにどの角度においても同一な条件で測定した弾性散乱に、捕集効率を掛けた相対微分断面積を掛けることにより非弾性散乱の相対微分断面積を求めると図2のようになった。

$$\frac{I_{inel}}{I_{el}} = \frac{\left(\frac{d\sigma_{inel}}{d\Omega}\right)}{\left(\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}\right)} \quad I'_{el} \times h(\theta) = \left(\frac{d\sigma'_{el}}{d\Omega}\right)_{relative}$$

より、

$$\left(\frac{d\sigma_{inel}}{d\Omega}\right) = \frac{I_{inel}}{I_{el}} \times \frac{d\sigma'_{el}}{d\Omega}$$

となる。

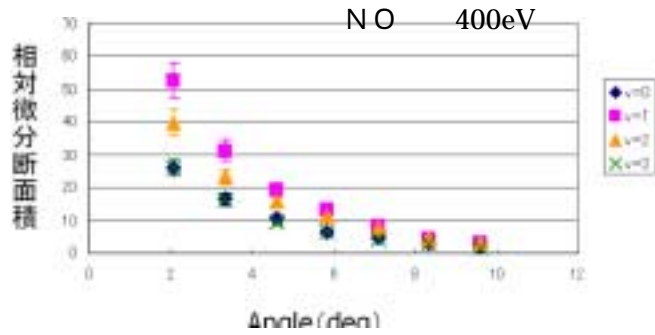


図2 NOの相対微分断面積

RGOS への変換

相対微分断面積とRGOSの関係[1]は

$$(RGOS) = \frac{W k_i}{2 k_f} K^2 \times \frac{d\sigma_{inel}}{d\Omega}$$

K_i : 始状態の運動量 K_f : 終状態の運動量 W : 励起エネルギー
 となっているので、この式を用いてRGOSに変換すると図3のようになった。

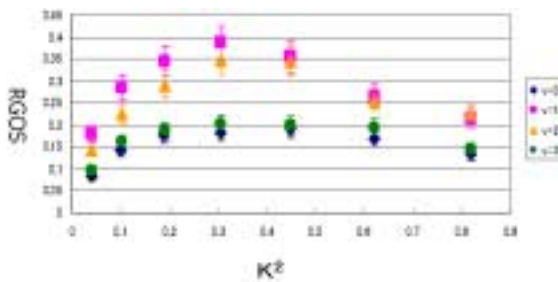


図3 NOのRGOS

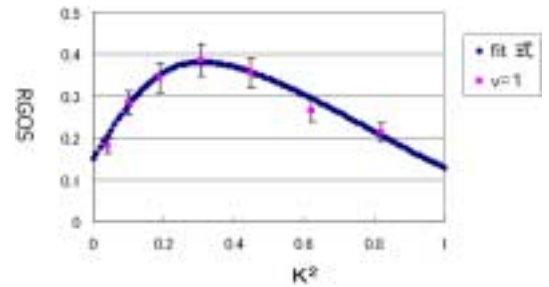


図4 Lassetreによる近似

Lassetreの近似式

RGOSを K^2 で0に外装する為にLassetreの近似式[2]を用いる。

$$F'(K^2) = \frac{1}{(1+x^2)^{l+l'+5}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(\frac{x^2}{1+x^2} \right)^n \right] \quad x = \frac{K}{\sqrt{2I + \sqrt{2(I-W)}}}$$

l : 始状態の角運動量子数 l' : 終状態の角運動量子数
 a_n : 任意のパラメータ I : イオン化ポテンシャル

この式で、 $a_0=0.15$ 、 $a_1=1.8$ 、 $a_2=-0.1$ 、 $a_3=-0.1$ 、 $a_4=10$ の条件で 系列 $v=1$ をフィッティングすると図4のようになった。また、この時 $F'(0)=0.15$ となった。

RGOSの規格化

系列 $\nu=1$ の光学的振動子強度は 7.78×10^{-4} である[3]ので、

$$(GOS) = 7.78 \times 10^{-4} / 0.15 \times (RGOS)$$

を計算することにより RGOS は GOS へと規格化出来る。

また、他の RGOS も光学的振動子強度との比は同じであるので同様の計算を行うことにより GOS に規格化できる。また、以上と同様の操作を 300eV でのスペクトルに対しても行うことにより図 5 - 1 ~ 4 を得た。

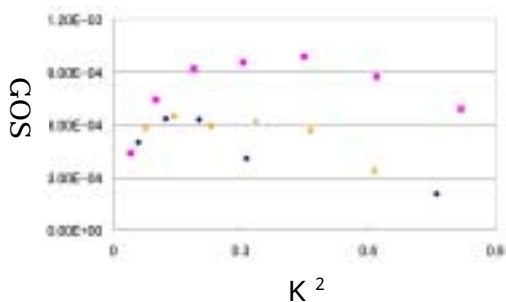


図 5 - 1 系列 $\nu=0$ の GOS

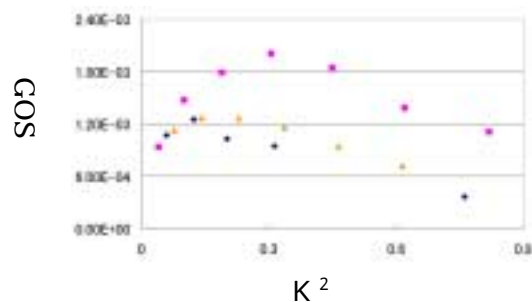


図 5 - 2 系列 $\nu=1$ の GOS

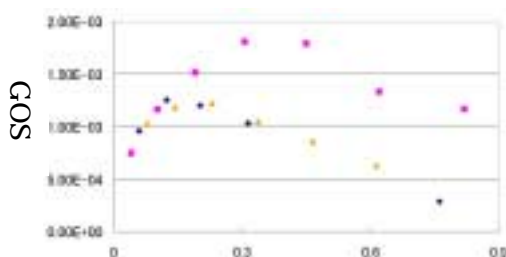


図 5 - 3 系列 $\nu=2$ の GOS

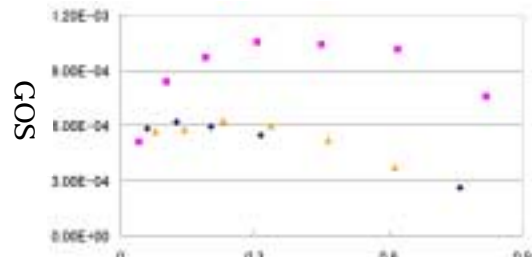


図 5 - 4 系列 $\nu=3$ の GOS

・ まとめ

GOS の極大値は $K^2 = 0.2$ にあることが確かめられた。

また、300eV では 500eV に近い値が出ているのでボルン近似に従っているものと考えられる。400eV でのずれはノイズの処理と電子ビームが十分に絞れていなかった事などによる角分布の測定ミスの可能性が考えられる。

そこで今後の課題としては、ノイズ低減のために装置の洗浄やビームをより絞る為のレンズ調整などを行い 400eV での角分布の再測定をする必要がある。

・ 参考文献

- [1] 化学のための原子衝突入門 金子洋三郎 著
- [2] M.A.Dillon and E.N.Lassetre, J.Chem.Phys.62,2373(1975)
- [3] Zhu.et.al, Chinese Phys 11 1149(2002)