

# NO 分子と N<sub>2</sub> 分子のエネルギー損失スペクトルの

## 測定とその比較

山田千櫨研究室 梅田直樹

### 1. 目的

NO 分子は大気汚染物質の一つであるが、その性質や特定の反応の頻度を知るために必要な各励起状態への微分断面積の実測例や振動子強度と結びつける研究は比較的少ない。私たちの研究室では電子エネルギー損失分光法を用いた NO 分子の微分断面積や一般化振動子強度の測定と解析を行っているが、私の目的は異核二原子分子であり、最も外側の  $2\pi$  軌道に不対電子を持つ NO 分子と、等核二原子分子であり、NO 分子より電子が 1 つ少ない、それゆえ  $2\pi$  軌道に電子を持たない N<sub>2</sub> 分子のエネルギー損失スペクトルの測定とその比較をすることである。

### 2. 原理

#### 電子エネルギー損失分光法

電子エネルギー損失分光法は、電子—標的間の衝突により標的の内部状態を変化させ、その変化を電子の運動エネルギーの変化として測定をする方法である。その原理は、一定の運動エネルギーを持つ電子を標的に入射、衝突させ、散乱されてきた電子のエネルギーを測定することによる。衝突の前後でエネルギー保存則が成り立つため、下の関係式が成立する。

$$\text{入射電子のエネルギー} = \text{内部状態の変化に使われたエネルギー} + \text{散乱電子のエネルギー}$$

下の図1に衝突の概図を、図2に電子エネルギー損失分光法を用いて得られるエネルギー損失スペクトルを示す。

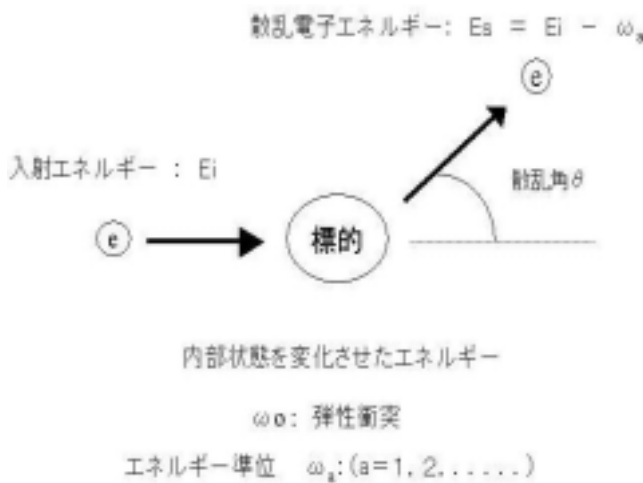


図1 衝突概図

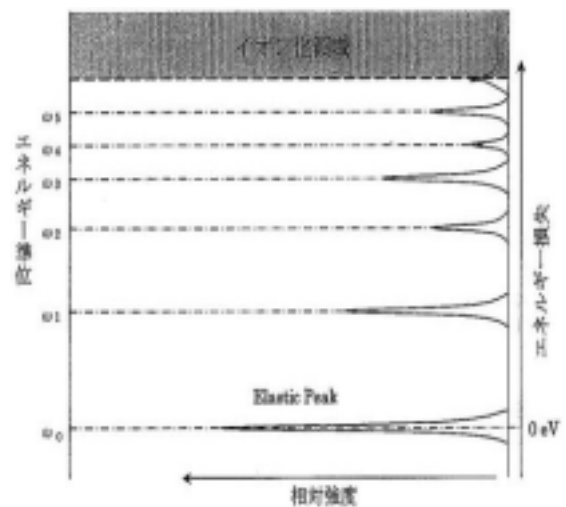
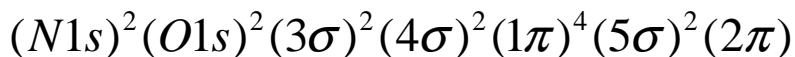


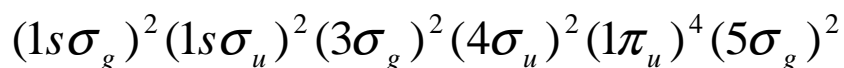
図2 エネルギー損失スペクトル

比較する NO 分子と N<sub>2</sub> 分子の電子配置は以下のようなものである。

NO 分子： 異核二原子分子



N<sub>2</sub> 分子： 等核二原子分子



### 3. 実験装置

実験装置は主に、電子を打ち出す電子銃部(電子銃、エネルギー選別器)、衝突を起こす衝突領域、及び電子を検出する、検出器部(エネルギー選別器、チャンネルトロン)からなる。これらは、 $1 \times 10^{-7} \sim 1 \times 10^{-8}$  Torr に保たれた真空チェンバー内に収められており、ターボ分子ポンプ(TMP)とロータリーポンプ(RP)によって排気されている。また、電子銃部と検出器部はそれぞれ非磁性のステンレスケースに密封されており、各々を TMP と RP によって差動排気している。これは、標的ガスが電子銃部や検出器部に流れ込んでその内部が汚染されるのを避ける目的で行われている。

下の図3に装置の全体図、図4に装置の主要部分を示す。

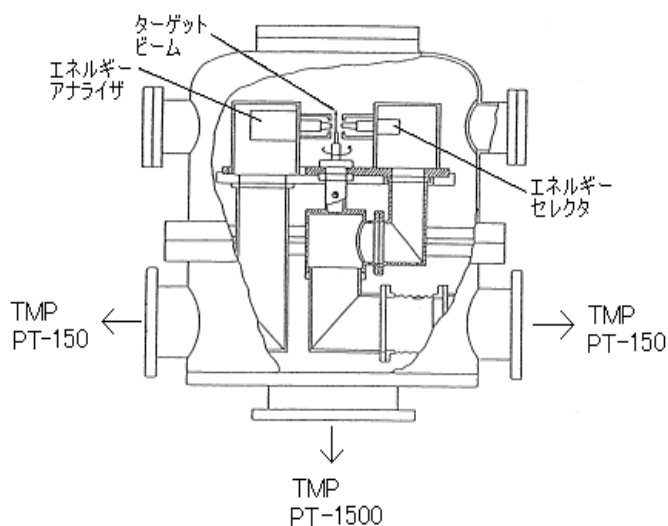


図3 装置の全体図

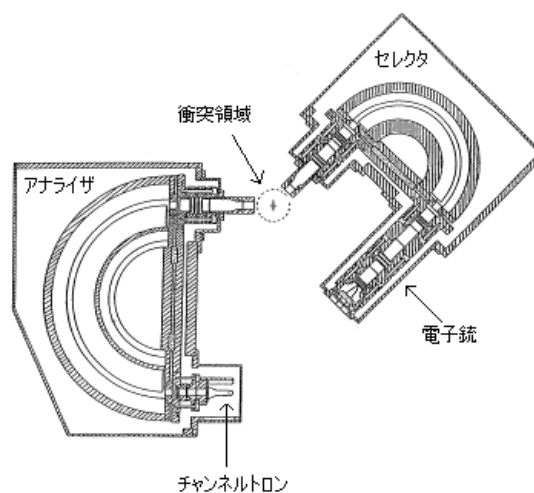


図4 装置の主要部分

なお、電子銃部は衝突領域を中心に電子ビームが-15度から110度まで回転可能なターンテーブル上にある。これにより-15度から110度の範囲の散乱角についての測定を可能としている。

#### 4. 結果

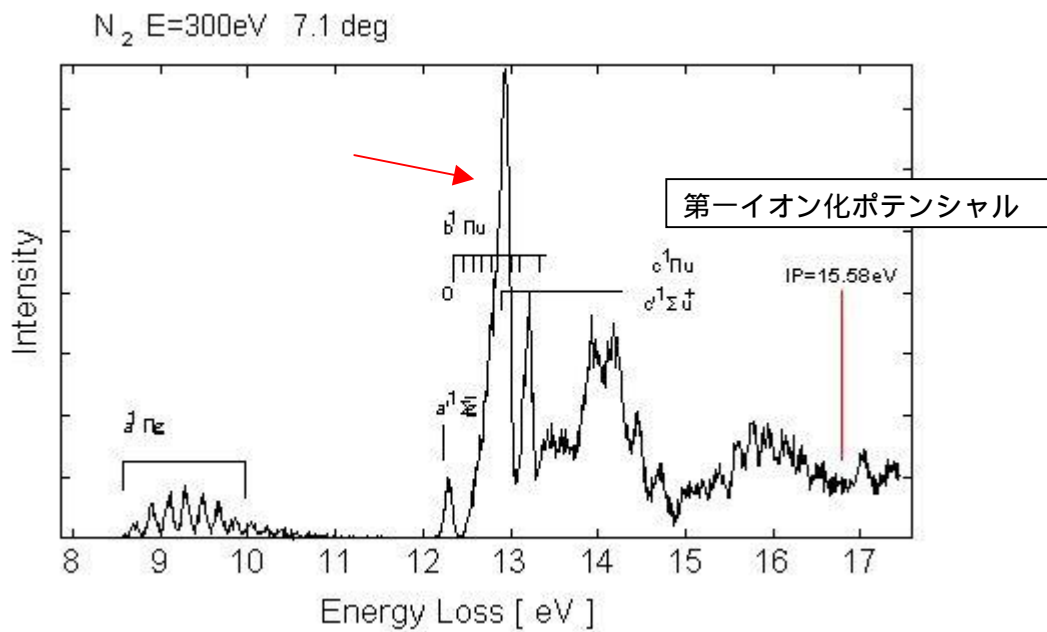


図5 N<sub>2</sub>分子 入射エネルギー300eV 散乱角7.1度

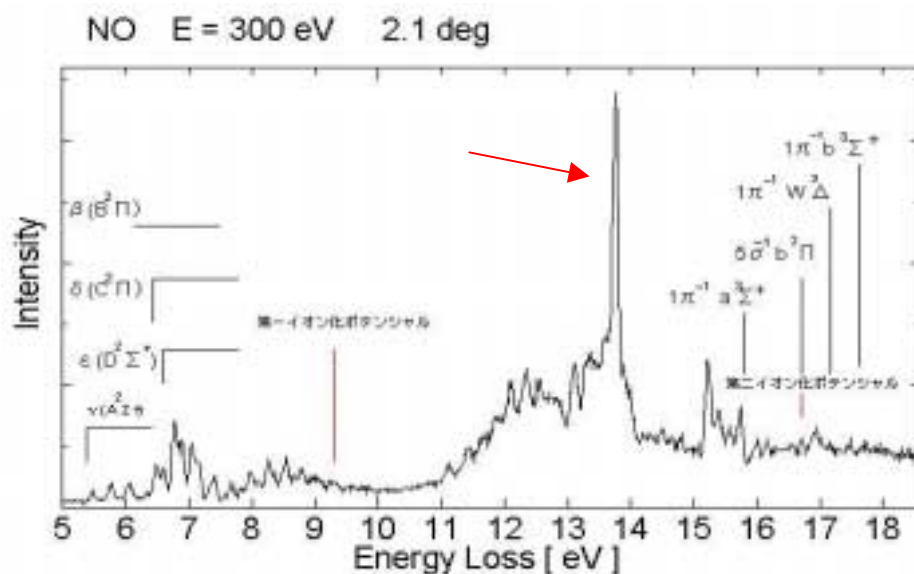


図6 NO分子 入射エネルギー300eV 散乱角2.1度

図5、図6は測定したN<sub>2</sub>分子及びNO分子のエネルギー損失スペクトルである。N<sub>2</sub>分子のスペクトルと、NO分子の第一イオン化ポテンシャル以降のピークがおおむね対応していることがわかる。これはNO分子の第一イオン化ポテンシャル以降の遷移は主に5σ、あるいは1π電子によるものであるからである。特に、それぞれの図中の赤の矢印で示されている励起は、N<sub>2</sub>分子は5σ<sub>g</sub>から3pπ<sub>u</sub>へ、NO分子は5σから3pπへの遷移によるものであり、これらに対応していることはW.F.Chanらによって確認されている。

図7に NO 分子の第一イオン化ポテンシャル以前のスペクトルを示す。

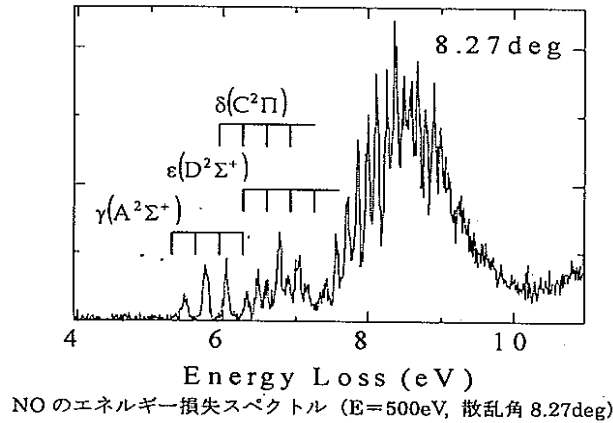


図7 NO の第一イオン化ポテンシャル以前のスペクトル

NO 分子の第一イオン化ポテンシャル以前、特に5~7.5eV 近辺のピークは主に  $2\pi$  電子の励起によるものであり、 $2\pi$  から  $6\sigma$  軌道へ、 $2\pi$  から  $4\pi$  軌道へ、 $2\pi$  から  $7\sigma$  軌道への遷移はそれぞれ  $\gamma$  系列、 $\epsilon$  系列、 $\delta$  系列と呼ばれている。これらの遷移は  $2\pi$  軌道に電子を持たない  $N_2$  分子のスペクトルでは当然見られない。

## 5. まとめ

実験の結果から、 $N_2$  分子のスペクトルと NO 分子の第一イオン化ポテンシャル以降のスペクトルが似ていることがわかった。

また、エネルギー損失スペクトルには角度依存性とエネルギー依存性があることがわかった。これは運動量移行  $K$  に散乱角のパラメーターがあるためであり、エネルギー依存性は入射エネルギーが入射電子の運動量に対応しているため  $K$  のパラメーターに含まれているからである。

$$K = \sqrt{k_i^2 + k_s^2 - 2k_i k_s \cos \theta}$$

$k_i$ : 入射電子の運動量

$k_s$ : 散乱電子の電子の運動量

$\theta$ : 散乱角

入射エネルギーや散乱角を運動量移行に換算することにエネルギー損失スペクトルを統一的に比較することができることがわかった。

一般化振動子強度は  $K^2$  のみの関数であるから本実験で得られるエネルギー損失スペクトルの測定は一般化振動子強度に結び付けられることがわかった。