

2 電子励起 HD 分子の解離過程における空間反転対称性の破れ Breaking space-inversion symmetry in the dissociation of doubly excited HD molecules

穂坂綱一^{1,*}, 鳥塚祐太郎¹, Philipp Schmidt², Andre Knie², Arno Ehresmann²,
小田切丈³, 北島昌史¹, 河内宣之¹

¹ 東京工業大学, 〒152-8551, 目黒区大岡山 2-12-1

² カッセル大学, D-34132, ドイツ カッセル *Heinrich-Plett-Straße 40*

³ 上智大学, 〒102-8554, 千代田区紀尾井町 7-1

Kouichi Hosaka^{1,*}, Yutaro Torizuka¹, Philipp Schmidt², Andre Knie²,
Arno Ehresmann², Takeshi Odagiri³, Masashi Kitajima¹ and Noriyuki Kouchi¹

¹ Tokyo Institute of Technology, Meguro-ku, Tokyo, 152-8551, Japan

² University of Kassel, Kassel, D-34132, Germany

³ Sophia University, Chiyoda-ku, Tokyo, 102-8554, Japan

1 はじめに

2 電子励起分子はイオン化エネルギー以上の超励起状態であり、その電子状態が持つ連続状態成分により、ポテンシャルエネルギー曲線すら信頼の計算は水素分子に限定されている。我々は水素分子の 2 電子励起状態を、励起原子ペア生成断面積測定により研究してきた[1]。本研究では、HD 分子の H(2p)-D(2p)原子ペア生成振動子強度を H₂ 及び D₂ の 2p 原子ペア生成振動子強度と比較した[2]。HD の電子状態は Born-Oppenheimer 近似に基づき gerade (g) 及び ungerade (u) のラベルを持つが、空間反転対称性を失った HD 分子では g-u 状態間の非断熱遷移が起こり得る。束縛状態の高分解能分光により、隣接する g-u 振動回転状態間の相互作用が研究されているが、解離過程における g-u 状態間の非断熱遷移は未解明であった。

2 実験

H(2p)-D(2p)原子ペアから放出される Lyman- α 光子ペアを同時計数し、その同時計数率を励起光子エネルギー(30-40 eV)の関数として測定し、断面積曲線を得た。既報の H₂ 分子の 2p 原子ペア生成断面積[1]を基準に、HD の H(2p)-D(2p)原子ペア生成断面積を絶対値スケールで決定した。断面積曲線の形状から、その前駆状態を H₂, D₂ 同様単独の Q₂ ¹Π_u(1)状態と決定し、2p 原子ペア生成振動子強度 f_{2p2p} を求めた。

3 結果および考察

図 1 に、H₂, HD, D₂ の 2p 原子ペア生成振動子強度 f_{2p2p} と中性解離振動子強度 f_{ND} の関係を示す。2 電子励起分子の崩壊過程では、自動イオン化と中性解離が競合し、軽い同位体ほど解離速度が速い。そのため、中性解離振動子強度 f_{ND} は H₂ > HD > D₂ である。図 1

において、その傾きは全中性解離過程の 2p 原子ペア生成過程への分岐比であり、共通の傾きを示す H₂ と D₂ はその崩壊過程に同位体効果が無い[1]。一方、HD の f_{2p2p} は、H₂ と D₂ から予想された値(+)よりも 10%-20%程度大きかった。

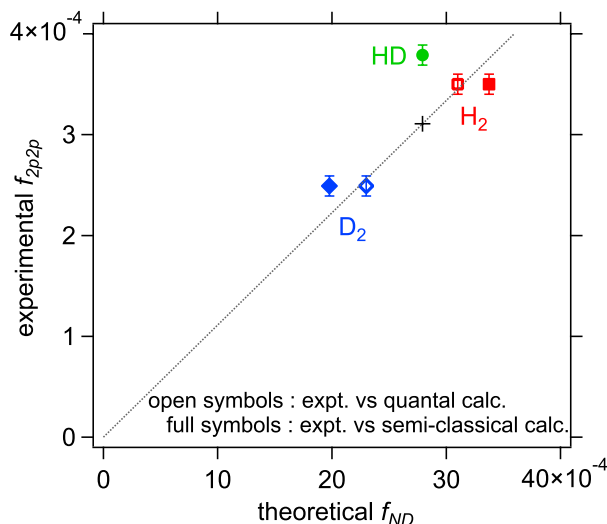


図 1 : H₂, HD, D₂ の 2p 原子ペア生成振動子強度 f_{2p2p} と中性解離振動子強度 f_{ND} の関係[2]

この相対的に大きな HD の f_{2p2p} は解離過程における HD 特有の非断熱遷移に起因している。図 2 に水素分子のポテンシャルエネルギー曲線に基づき作成した、考える 2 電子励起と非断熱遷移の関係を示す。ポテンシャルエネルギー曲線は Born-Oppenheimer 近似に基づき計算されており、そこには同位体効果は無い。図中の A-E はポテンシャルエネルギー曲線の交差、及び擬交差である。H₂ と D₂ では g-u 状態間の非断熱遷移が起こらず、Q₂ ¹Π_u(1)状態へ光励起した

水素分子は、擬交差 A で $Q_2^1\Pi_u(2)$ 状態へ移り $2s+2p$ ペアを生成するか、 $Q_2^1\Pi_u(1)$ 状態に止まり $2p+2p$ ペアを生成する。一方、HD では、擬交差 A での非断熱遷移に加え、ポテンシャル交差 B-E で g-u 状態間の非断熱遷移が起こりうる。これらのうち、B 及び D での非断熱遷移に $2s+2p$ ペアは減り、 $2p+2p$ ペアが増える。これらの非断熱遷移が HD で f_{2p} を増大させた主因であろう。

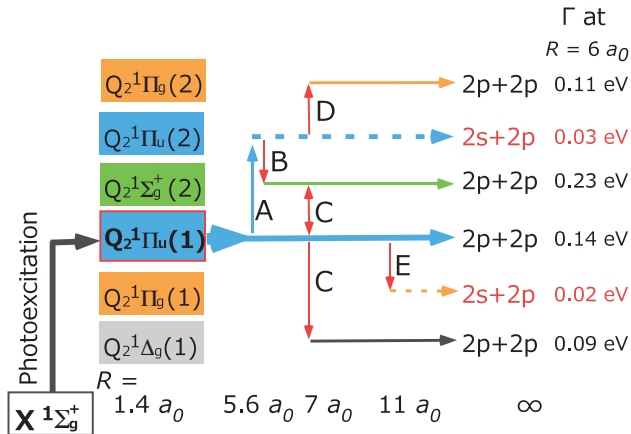


図 2：考えられる 2 電子励起状態と非断熱遷移[2]

4 まとめ

HD の H(2p)-D(2p)原子ペア生成振動子強度を測定し、H₂及び D₂の 2p 原子ペア生成振動子強度と比較した。H₂及び D₂から推測される値よりも 10-20%程度大きいHDの振動子強度は、H₂及びD₂には無い g-u 状態間の非断熱遷移に起因する事を見出した。

参考文献

- [1] K. Hosaka *et al.*, Phys. Rev. A **93**, 063423 (2016).
- [2] K. Hosaka *et al.*, Phys. Rev. A **99**, 033423 (2019).

* hosakak@chem.titech.ac.jp