

C₂ の多電子状態の同時摂動解析

(岡山大院自然科学) ○唐健・陳望・川口建太郎

Simultaneous deperturbation for the multiple electronic states of C₂
(Okayama Univ.) Jian Tang, Wang Chen, Kentarou Kawaguchi

In this symposium of the last year and a recent paper¹, we reported a simultaneous analysis for the Phillips and Ballik-Ramsay band systems with a deperturbation treatment for the X¹Σ_g⁺ and b³Σ_g⁻ states of C₂ and also, for the first time, the observation of the forbidden transitions between the singlet and triplet states of C₂. In the present study, we consider the interaction between the a³Π_u and c³Σ_u⁺ to remove some anomalous higher order constants of the a³Π_u state in the previous work. The local interaction between the a³Π_u v=7 and c³Σ_u⁺ v=1 states has been considered in a recent analysis² for the perturbation of the spectrum. We considered the interaction between all the vibrational states of the a³Π_u and c³Σ_u⁺ states with a set of Dunham-like constants. The progress and results will be presented.

前回の会および最近発表した論文¹では、C₂ の Phillip および Ballik-Ramsay バンドシステムについて同時解析を行って、X¹Σ_g⁺ と b³Σ_g⁻ 電子状態の摂動解析によって一重項と三重項間の禁制遷移を初めて帰属できた。その解析の中には a³Π_u 状態のいくつかの高次の Λ-type 分裂定数が異常であることが分かっていた。本研究はその異常を取り除くために、a³Π_u と c³Σ_u⁺ 状態の相互作用を考慮した。最近、Nakajima and Endo はすでに a³Π_u v=7 と c³Σ_u⁺ v=1 の間の振電相互作用を解析し、d³Π_g-c³Σ_u⁺ バンドシステムの最も大きな摂動を解析した²。我々は振動量子数 v に展開した Dunham-like 分子定数を用いて、a³Π_u の v=12 までまたは c³Σ_u⁺ の v=9 までの振動状態間の相互作用を考慮することを試みた。図 1 には a³Π_u の v=1-8 までのそれぞれ振動状態の振電相互作用により c³Σ_u⁺ v=1 の回転準位のエネルギー変化の計算値を示している。a³Π_u v=7 と c³Σ_u⁺ v=1 の J=18 前後に最大 10 cm⁻¹ の摂動は文献 2 で既に解析した。a³Π_u のその他の振動状態は c³Σ_u⁺ v=1 に対して最大 2 cm⁻¹ のエネルギーシフトを与えことがわかる。a³Π_u v=8 からの影響は非常に小さく、その以上の高い振動の影響は無視できると分かった。詳しい解析の結果と進展を報告するつもりである。

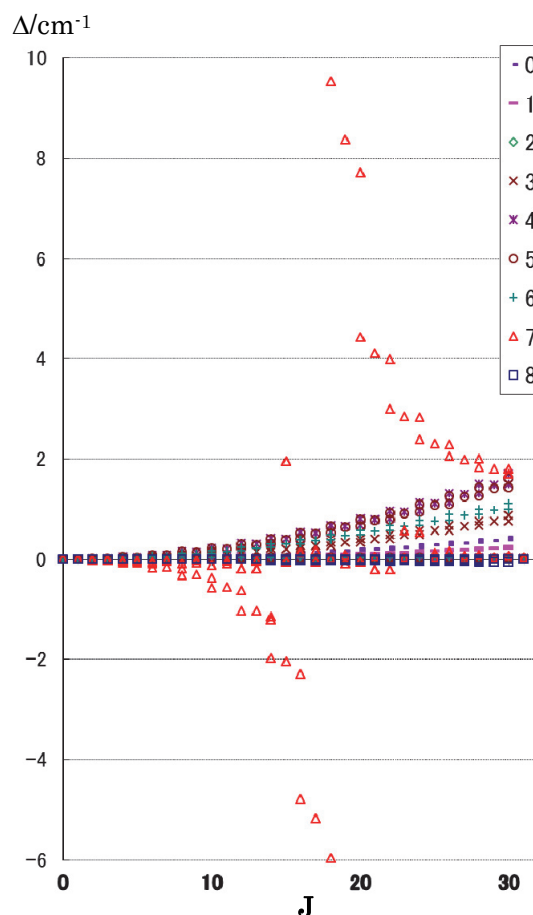


図 1. 各 a³Π_u v=0-8 状態の振電相互作用により c³Σ_u⁺ v=1 の回転準位のエネルギー変化

1. W. Chen, K. Kawaguchi, P. F. Bernath, and J. Tang, *J. Chem. Phys.* **142**, 064317 (2015).
2. M. Nakajima and Y. Endo, *J. Mol. Spectrosc.* **302**, 9 (2014).