

# 原子や分子の光電効果、理論計算 による帰属を体験してみよう

**実験:**

UVSOR施設 光化学測定器開発研究部門

繁政英治(准教授)、岩山洋士(助教)、石川理沙(PD)

**計算:**

光分子科学研究領域 光分子科学第三研究部門

小杉信博(教授)

UVSOR FACILITY

INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE

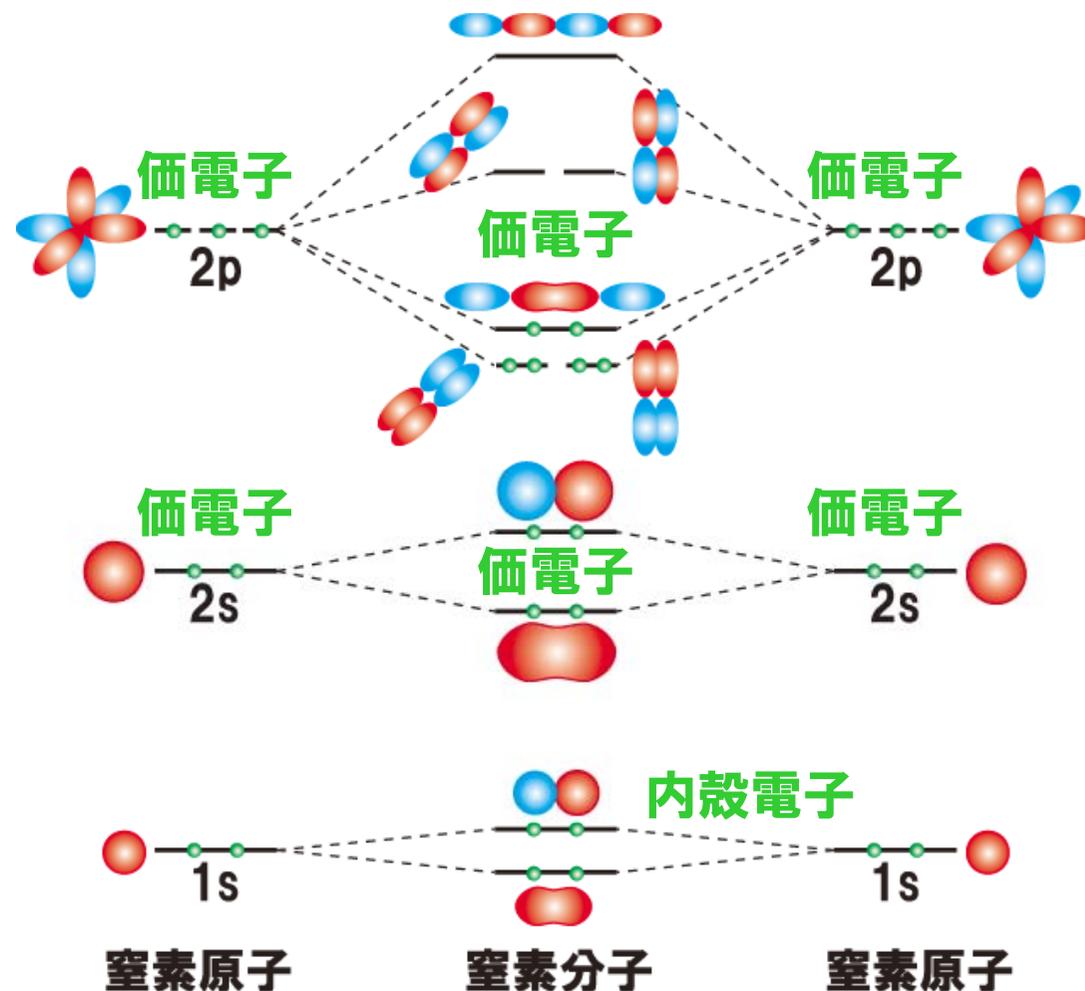
# 原子や分子内の電子の状態

**現代の物質観**:物質は原子や分子から構成されており、その性質には、原子や分子内の電子、特に価電子が重要な役割を果たしている。

**自分達で確かめてみよう**

光電子分光法は、光によって電子を飛び出させ、その運動エネルギーを測定することにより、物質の電子構造を直接調べる方法です。

原子や分子の**電子スペクトル**を実際に観測し、**量子化学計算**との比較によって、先達によって築き上げられた**物質観の正さを再認識する企画**です。



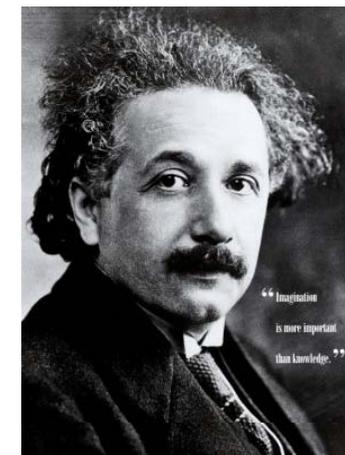
UVSOR FACILITY

INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE

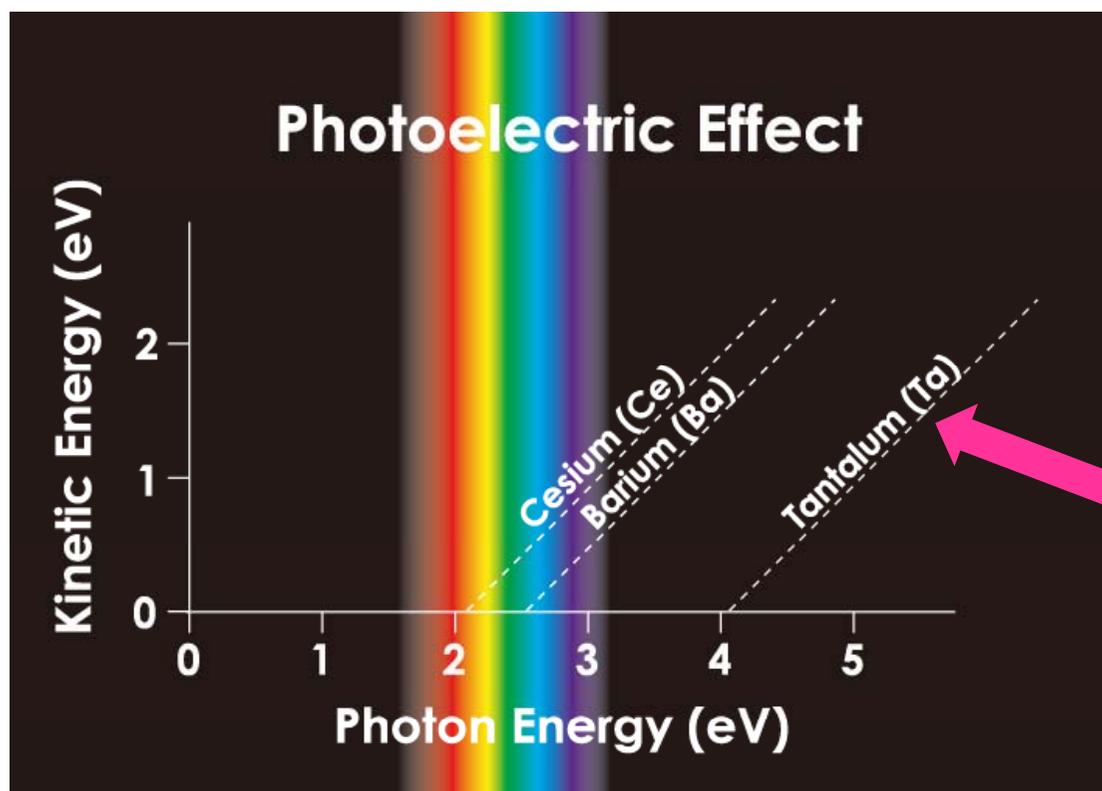
# 光電子分光法：光電効果の利用

$$KE = h\nu - BE$$

KE: 光電子の運動エネルギー  
hν: 光子のエネルギー  
BE: 電子の束縛エネルギー



Albert Einstein  
(1897-1955)



物質から飛び出してくる電子のエネルギーは、光子エネルギーに比例

光エネルギー固定 → 物質中の電子束縛エネルギー → 光電子分光法

# 分子軌道概念とイオン化ポテンシャル

$$KE = h\nu - BE$$

KE: 光電子の運動エネルギー  
hν: 光子のエネルギー  
BE: 電子の束縛エネルギー

電子の束縛エネルギーは、中性分子を+1価のカチオン分子にするために最小限、必要なエネルギー、つまりイオン化ポテンシャルです。

イオン化ポテンシャルの計算値にはいろいろなレベルのものがあります。以下の3種類の量子化学計算で実験値との違いを比較してみます。

- 1) 分子の基底状態計算で求まる分子軌道のエネルギーを使う。
- 2) カチオン分子のエネルギーを分子軌道計算で求め、中性分子との差をとる。
- 3) 中性分子、カチオン分子、それぞれ、分子軌道計算の近似を越えたレベルでイオン化ポテンシャルを求め、分子軌道の有用性を考える。

# 体験入学の内容

空気を真空容器内に導入し、極紫外光による価電子領域の光電子スペクトルを測定します。空気の主成分である窒素、酸素、アルゴンについて、各成分の純粋な光電子スペクトルを測定します。各成分のイオン化エネルギーを量子化学計算によって求め、測定結果と比較します。

## スケジュール

### 1日目

- ・実験に関する予備知識の学習
- ・気体の光電子スペクトル測定
- ・データ解析

### 2日目

- ・計算に関する予備知識の学習
- ・量子化学計算の実習
- ・発表準備



MBS A-1  
BL6U UVSOR

※加速器及びビームラインの整備状況によって実験内容が変わることがあります。