

UF₆ 2₃ バンドのスペクトルシミュレーション

1993年3月

動力炉・核燃料開発事業団
東海事業所

複製又はこの資料の入手については、下記にお問い合わせ下さい。

〒319-11 茨城県那珂郡東海村大字村松 4 - 33

動力炉・核燃料開発事業団 東海事業所

技術開発推進部 技術管理室

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:
Technology Management Section, Tokai Works, Power Reactor and Nuclear Fuel
Development Corporation 4-33, Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki,
319-11, Japan)

動力炉・核燃料開発事業団 (Power Reactor and Nuclear Fuel Development
Corporation)1993

UF₆ ν₃ バンドのスペクトルシミュレーション

中澤 修、須藤 收、島崎 善広

要 旨

UF₆ ν₃ の振動・回転スペクトルのシミュレーションを行い、スペクトルの回転温度依存性、吸収線形状、幅の依存性を調べた。また、吸収線幅の原因となる分子衝突拡がり、ドップラー拡がり、レーザー光によるパワー拡がりを計算し、Qブランチの形状や同位体を含むスペクトルの変化を調べた。さらに、これらの計算結果を基に相対的解離率と分離の効率について計算した。その結果、(1)サブバンドヘッドの強度を比較することにより、回転温度のおおよその値を得ることができる。(2)考慮したスペクトル幅の拡がりは、衝突拡がり<ドップラー拡がり<パワー拡がりであり、吸収スペクトル測定時ではドップラー拡がりが効くが、多光子解離過程を引き起こすような強い光ではパワー拡がりが優勢となる。(3)極低温において、²³⁸UF₆ Rブランチと明確に分離している ²³⁵UF₆ Qブランチも、レーザーパワー拡がりによってブロードなスペクトルに変化し、分離の効率が低下する。(4)スペクトルの重なりだけが分離過程となる簡単な仮定のもとでは、²³⁵UF₆ Qブランチに対応する波長が最も効果的である。以上のことが分かった。

目 次

1. 序	1
2. 原理・方法	1
(1) ハミルトニアン	1
(2) 吸収強度	3
(3) 吸収線形状	4
(4) 選択則	5
(5) 計算方法	5
3. 結果・考察	6
(1) 振動・回転スペクトルの特徴	6
(2) スペクトル幅の比較	6
(3) 吸収線幅を考慮した振動・回転スペクトル	7
(4) 同位体分離への応用	7
4. まとめ	8
5. 参考文献	8

1. 序

赤外レーザー多光子解離による同位体分離法では、対象分子の吸収スペクトルを理解することが重要である。例えばこの方法が注目される発端となったSF₆分子でも、赤外領域における振動バンドの測定により、使用されるレーザー光の波長が決められた。このS(硫黄)の同位体分離が成功したため、ウランの同位体分離へ応用されることとなった。

ウランもUF₆の化学形態をとり、赤外吸収スペクトルが測定されている。特に注目すべきは反応座標に沿った非全対称伸縮モードであり、このモードの振動・回転構造を理解することが重要となってくる。一方、吸収スペクトルが表す分子のエネルギー準位は分子固有のものであるが、各回転準位の吸収線幅は物理的な環境に支配されているため、様々な影響を受けることが考えられる。そこで、このバンドの吸収線幅に注目し、線幅が振動・回転スペクトルにどう影響するかを調べ、分子の環境についての考察を行った。

2. 原理・方法

(1). ハミルトニアン

剛体回転子近似した3重縮重振動状態にあるSpherical topのハミルトニアンは、コリオリ相互作用も含めて以下のスカラー式で表される。⁽¹⁾

$$H_{\text{scalar}} = H_{\text{rot}} + \nu_{\text{vib}} - 2B\zeta J \cdot \ell$$

$$, \langle H_{\text{rot}} \rangle = BJ(J+1) + D[J(J+1)]^2 \dots$$

$2 \langle J \cdot \ell \rangle = J^2 - (J-1)^2 + 1^2 = J^2 - N^2 + 1^2$ であるから、D項以下を省略するとエネルギーレベルは以下の式で表される。

$$\begin{aligned} F_v(N) &= \langle H_{\text{rot}} \rangle + \nu_{\text{vib}} - 2B\zeta \langle J \cdot \ell \rangle \\ &= \nu_{\text{vib}} + BJ(J+1) \\ &\quad - B\zeta [J(J+1) - N(N+1) + \ell(\ell+1)] \\ &= \nu_{\text{vib}} - 2B\zeta + BN(N+1) \\ &\quad + \begin{cases} 2B(1-\zeta)(N+1) & : J=N+1 \\ 0 & : J=N \\ -2B(1-\zeta)N & : J=N-1 \end{cases} \end{aligned}$$

$$, J_{\text{total}} = N_{\text{rotation}} + \ell_{\text{vibration}}$$

ボルン・オッペンハイマー近似の範囲内ではNが良い量子数となるため、分裂した準位間の遷移を、赤外吸収の表現に準じて以下のように表すことができる。

$$\begin{cases} \ell = +1 \text{ の場合} & : P^+(N), & Q^+(N), & R^+(N) \\ \ell = 0 \text{ の場合} & : P^0(N), & Q^0(N), & R^0(N) \\ \ell = -1 \text{ の場合} & : P^-(N), & Q^-(N), & R^-(N) \end{cases}$$

また、基底状態 $| [l=0 N] J=N \rangle$ から振動励起状態 $| [l=1 N] J \rangle$ への双極子遷移

の行列要素には 9 j 記号が含まれ、これより双極子選択則が導かれる。

$$J = N \rightarrow J' = N - 1, N, N + 1$$

ここまで、コリオリ相互作用を含めた剛体回転子について述べてきたが、実際のスペクトルではさらに複雑な微細構造が観測されている。この微細構造は分子の対称性に由来するもので、Racah, G による振動-回転テンソルハミルトニアンより”テンソル”効果と一般には呼ばれている。このハミルトニアン H_{tensor} は以下の式で表される。

$$H_{\text{tensor}} = \sum_{k_1, k_2, K} t_{k_1, k_2, K} [v^{k_1}(\text{vib}) \times v^{k_2}(\text{rot})]^K_A$$

$$= t_{044} [v^4(\text{rot})]^4_A + t_{224} [v^2(\text{vib}) \times v^2(\text{rot})]^4_A + \dots$$

Moret-Baillyはこの O_h 対称テンソル項を以下の式で表した。(2)

$$H_{\text{tensor}} = t_{\substack{4 R' R \\ A1 P' P}} F, \quad F: \text{Moret-Bailly Coef.}$$

Galbraith らはMoret-Bailly係数に適当な近似を加え、3 j 記号によるより簡単な表現を示した。(3)

$$F_{\substack{4 R' R \\ A1 P' P}} \sim (-1)^K \begin{pmatrix} 7 \\ - \\ 12 \end{pmatrix}^{-1/2} \begin{pmatrix} J & 4 & J \\ & & \\ -K & 0 & K \end{pmatrix}$$

なお、スペクトルの微細構造は C_4 軸と C_3 軸の回転に起因する2つのクラスターに分類され、 C_4 軸のクラスターでは係数1、 C_3 軸のクラスターには $-2/3$ が掛けられる。また、1次近似の最終的なエネルギーの表現は以下のとおりである。

$$P(J) = m - nJ + pJ^2 - qJ^3 + t_{\substack{4 J J \\ A1 P' P}} F$$

$$Q(J) = m + vJ(J+1) + t_{\substack{4 J J \\ A1 P' P}} F$$

$$R(J) = m + n(J+1) + p(J+1)^2 - q(J+1)^3 + t_{\substack{4 J J \\ A1 P' P}} F$$

$$t_{\substack{4 J J \\ A1 P' P}} F = \begin{pmatrix} 7 \\ - \\ 12 \end{pmatrix}^{-1/2} [6(J+2)(J+1)J(J-1) - 10K^2(6J^2+6J-5) + 70K^4]$$

$$\times \begin{cases} (g+hJ)[2J(2J-1)]^{-1} & : \text{P branch} \\ -2g[2J(2J+2)]^{-2} & : \text{Q branch} \\ [g-h(J+1)][(2J+2)(2J+3)]^{-1} & : \text{R branch} \end{cases}$$

もちろん、C₃ 軸クラスターでは -2/3 倍される。なお、m、n、p、q、v、g、h は、実測により決定される分子定数である。

(2). 吸収強度

Fox によれば、Spherical top の赤外活性振動モードにおける吸収強度は以下の式で表される。(4)

$$S_{if} = (8\pi^3/3hc)(N/Z)(B_f - B_i) \langle \mu_{if} \rangle^2 \epsilon_i (e^{-E_{if}hc/kT} - e^{-E_{ihc/kT}})$$

N : number of molecules per cm³

Z : total partition function

i : initial state , f : final state

$\langle \mu_{if} \rangle$: matrix element of the molecular electric dipole moment

ϵ_i : nuclear spin statistical weight factor

S_{if} の J 依存性については、コリオリ相互作用を無視し、また $\langle \mu_{if} \rangle^2 = \langle \mu_{0i} \rangle^2 \times (2J_i + 1)$ で近似すると、 $\nu_i = 0$ では

$$S_{if} = (8\pi^3/3hc)N_0(Z_v Z_r)^{-1} \nu_{0i} \langle \mu_{0i} \rangle^2 (1 - e^{-\nu_{0i}hc/kT})$$

$$\times \sum_{J_i, J_f} (2J_i + 1) \epsilon_i e^{-BJ_i(J_i+1)hc/kT}$$

$$\begin{cases} J_f = J_i - 1 & : \text{P branch} \\ J_f = J_i & : \text{Q branch} \\ J_f = J_i + 1 & : \text{R branch} \end{cases}$$

Summation 前の項は各ブランチで共通した値をとるため、J に対応する吸収強度は以下の式で表せば良い。

$$\begin{cases} S_P = C(2J-1) \epsilon_P \exp[-B_0J(J+1)hc/kT] & : \text{P branch} \\ S_Q = C(2J+1) \epsilon_P \exp[-B_0J(J+1)hc/kT] & : \text{Q branch} \\ S_R = C(2J+3) \epsilon_P \exp[-B_0J(J+1)hc/kT] & : \text{R branch} \end{cases}$$

スペクトルシミュレーションを実行する場合、各吸収線の相対強度が分かればよいので C は規格化定数としてもよいが、 ϵ_P を与えなければならない。Cantrell らは、XY₃ 型の分子で Y がスピン 1/2 を持つ系のスピン統計的重みを示した。(5) それによると、O_h 群のサブグループ A₁, A₂, E, F₁(=T₁), F₂(=T₂) については、それぞれ 2, 10, 8, 6, 6 の重みを持ち、吸収線は対称表現に応じてこれらの和の重みを持つ。すなわち、

$$\epsilon_N = \sum_P \epsilon_P, \quad \epsilon_{A1}=2, \quad \epsilon_{A2}=10, \quad \epsilon_E=8, \quad \epsilon_{F1}=6, \quad \epsilon_{F2}=6$$

ここで、さらに吸収線の帰属を行う必要がある。C₁回転軸およびC₃回転軸によるクラスター（J, Kで規定される1群の吸収線）は、量子数Kの剰余類(modulo)によって分類される。

	分類	帰属	ϵ_N
C ₁ 回転軸 クラスター	K mod 4 = 0	A ₁ +E+F ₁	16
	K mod 4 = 1	F ₁ +F ₂	12
	K mod 4 = 2	A ₂ +E+F ₂	24
	K mod 4 = 3	F ₁ +F ₂	12
C ₃ 回転軸 クラスター	K mod 3 = 0	A ₁ +A ₂ +F ₁ +F ₂	24
	K mod 3 = 1	E+F ₁ +F ₂	20
	K mod 3 = 2	E+F ₁ +F ₂	20

以上により、各吸収線の強度が計算される。

(3). 吸収線形状

スペクトルの一般的な形状を解析的に記述するのは困難であるが、Voigt により導入された関数F(ω) が一般的に使われる。Voigt 関数はGaussianとLorentzianの中間の表現であり、δ→0でLorentzian、γ→0でGaussianとなる。⁽⁶⁾

$$F(\omega) = \frac{\gamma}{2^{1/2} \pi^{3/2} \delta} \int \frac{\exp[-(\omega - \nu)^2 / 2\delta^2]}{(\omega_0 - \nu)^2 + \gamma^2} d\nu$$

Lorentzian及びGaussianはスペクトル拡がりの原因によって決められるため、通常は最も支配的な拡がりの形状を採ることが多い。以下に代表的な拡がりとその半値半幅を示す。

- ① 衝突拡がり (Collisional broadening, Lorentzian)

$$\Delta_c = \frac{(8\pi)^{1/2} P a^2}{c (MkT)^{1/2}}$$

ここで、 P : 圧力 k : ボルツマン定数
 a : 相互作用距離 T : 温度
 M : 質量 c : 光速度

② ドップラー拡がり (Doppler broadening, Gaussian)

$$\Delta_d = \frac{\omega_0}{c} (k T 2 \ln 2 / M)^{1/2}$$

ここで、 ω_0 : 中心周波数

③ パワー拡がり (Power broadening, Lorentzian)

$$\Delta_p = \frac{2\pi}{h} |\mu| |E_0|$$

ここで、 h : プランク定数

μ : 双極子モーメント

E_0 : 電場の強さ

$$= (2 I (\mu_0 / \epsilon)^{1/2})^{1/2}$$

$$\text{or } (8 \pi I / c)^{1/2}$$

I : レーザーパワー

μ_0 : 真空の透磁率

ϵ : 誘電率

☆ FWHM = 2 Δ

なお、 $a = 4 \text{ \AA}$ 、 $M = 352 \text{ amu}$ 、 $\omega_0 = 6.28 \text{ cm}^{-1}$ 、 $\mu = 0.394 \text{ D}$ 、 $\epsilon = 1.008$
 ϵ_0 とした。 a の値は U-F 結合距離より推定した。また ϵ については、文献(7)の計算による外挿値を用いた。

(4). 選択則

(1) で示した双極子許容遷移では、 $J = N \rightarrow J' = N - 1, N, N + 1$ を満たすことが必要である。一方、Galbraith らは XY_2 型の回転構造が $J' = (2/9)J$ としたときの Symmetric-top の構造に良く似ていることに気付いた。例えば、 $J = 36$ の K の大きな領域は、Symmetric-top の $J = 8$ の構造に似ている。このことは、通常 $J \geq |K|$ で決まる K の範囲がもっと狭いことを示している。Brock らは更に以下の条件を示している。⁽⁸⁾

$$N \leq \begin{cases} J/5 - 1 & : C_4 \text{ 回転軸クラスター} \\ J/10 - 1 & : C_2 \text{ 回転軸クラスター} \end{cases}$$

(5). 計算方法

1 次近似のエネルギー表現及び吸収強度の式を用い、まず線幅を考慮しないスペクトルを計算する。ここでは吸収強度の式に含まれる温度 K について、スペクトルの

依存性を調べる。次に、温度、圧力条件を与えてスペクトル幅を見積り、スペクトルがどのように変化するかを調べる。最後に、同位体を含む吸収スペクトルを模擬し、分離の効率を調べる。

3. 結果・考察.

(1). 振動・回転スペクトルの特徴

まず、吸収強度の温度変化を示す。図1は回転量子数 J と温度 K に対する吸収強度 S 。(C, $\epsilon=1$)を示したものである。UF₆では回転定数が小さいため、 J の広い範囲に分子が分布していることが分かる。強度の極大は温度の増加と共に J の大きい方にシフトするが、400K程度でも S が値を持つのは、高々 $J \sim 100$ である。よって、計算時に考慮する J の範囲は ≤ 100 で十分と考えられる。

次に、回転量子数 J 、 K で決まる吸収線の位置関係を示す。図2は1次近似のエネルギー表現を用いて計算した、Qブランチのエネルギーと J 及び K の関係である。 J の増加に従って K の状態数も増え、エネルギーの広い範囲に分布することが分かる。各 J については、左側がC₃軸クラスター、右側がC₄軸クラスターの領域である。実際のスペクトルは図の各点に吸収強度の重みを与え、縦方向に足し合わせたものであるから、統計的重みが大きく、かつ位置が密集している部分に極大が生じる。特に、図の矢印で示した曲線の折り返し部分ではスペクトルに部分的な極大が生じ、サブバンドヘッドを形成する。

次に、計算したUF₆のQブランチのスペクトルを図3に示す。点線で示した部分がサブバンドヘッドであり、右側より Q_0 、 Q_1 、 Q_2 、 \dots となる。この図を見ると、サブバンドヘッドがある領域は J の比較的小さい部分であり、Qブランチの裾は J の大きい部分の寄与であることが分かる。温度が低い条件では、吸収は J の小さい部分に限られるので、その場合にはスペクトルは中心部分のみが現れると考えられる。いくつかの温度条件で計算した結果を図4に示す。 J の小さい領域はバンドヘッドの周辺に集まっているため、低温ではここに強度が集中していることが分かる。温度の上昇に従って左右に拡がり、サブバンドヘッドの数が増えてくる。このサブバンドヘッドの強度がQブランチの最も特徴的な部分であり、回転温度を如実に表している。よって、回転温度を評価する場合、20K以下の極低温では Q_0 と Q_1 の強度の比較により概算できるし、50~150 Kでは Q_0 、 Q_1 、 Q_2 、150 K以上では Q_0 、 Q_1 、 Q_2 の比較でおおよその値を求めることができる。実測したスペクトルと比較してみよう。図5は、超音速自由噴流中の極低温UF₆の吸収スペクトルと、本計算結果を比較したものである。⁽⁸⁾ バンドヘッドと Q_0 の比較より、13Kでほぼ同様のスペクトルを得ることができた。

(2). スペクトル幅の比較

2(3)の式に従って吸収線のスペクトル幅を計算した。圧力または衝突による拡がりの幅は2(3)①の式で表される。この式から、拡がりが圧力または相互作用距離の2乗に比例することが分かる。また、温度の平方根に逆比例する。図6にこの関係を図示した。図より、100Pa程度では極低温から常温まで 10^{-5} cm^{-1} のオーダーに収まっていることが

分かる。これに対してドップラー拡がりは温度の平方根に比例し、図7のような依存性を示す。幅のオーダーは 10^{-4} cm^{-1} 程度であるから、数百Pa以上かつ極低温でなければ、分子衝突の影響よりも大きいことになる。このように、赤外吸収を測定する場合はごく弱い光源で十分であるが、多光子遷移を引き起こすための光源には、レーザー光のような強い光源が必要となる。パワー拡がりも測定する光それ自体が被測定系に影響する現象であり、強度にして数MW/cm²以上のレーザー光で顕著となる。また、2準位系でのラビ周波数 γ より、パワー拡がりも $2|\gamma|$ で表される。2(3)③の式からは、パワー拡がりも双極子モーメントと電場に比例し、図8の依存性を示す。 10^4 W/m^2 程度では 10^{-4} cm^{-1} のオーダーであるから、ドップラー拡がりと同程度であるが、 10^5 W/m^2 以上になるとパワー拡がりも優勢となる。実際、赤外多光子解離には数MW/cm²のレーザー光が用いられているため、拡がりも $\sim \text{cm}^{-1}$ 程度となる。

以上に述べた幅の比較より、衝突拡がり<ドップラー拡がり<パワー拡がりの関係が得られた。そこで、スペクトルがもっとも大きな影響を受けるパワー拡がりを根拠に、ローレンツ型の形状を用いてシミュレーションを行うことにする。

(3). 吸収線幅を考慮した振動・回転スペクトル

幅の影響を図9に示す。10KのQブランチを拡大し、ローレンツ型、ガウス型、位置のみの3つを比較した。Q(J, K)が分かれている下の図に比べ、幅を考慮すると谷が埋まって包絡線形状を示す。温度を100Kに設定し、幅の依存性を調べたのが図10である。吸収線の半値幅が 0.05 cm^{-1} になると、Qブランチの構造はブロードな1つのピークに変化する。この幅に対応するレーザー強度は 10^7 W/m^2 程度であり、もしこの強度のレーザー光で吸収スペクトルを測定すれば、このようなブロードなスペクトルが観測される。なお、このスペクトルではP、Rブランチは考慮していない。

(4). 同位体分離への応用

ここでは、我々の最も興味ある部分である同位体の影響を調べることにする。これまでUF₆として取り扱ってきたのは、正確には²³⁸UF₆である。Fには同位体が存在しないので、²³⁵UF₆だけが対象となる。計算に必要な定数はAldridgeらの値を用いた。⁽¹⁰⁾

まず、²³⁵UF₆のQブランチが²³⁸UF₆のRブランチに重なる部分をシミュレートしてみることにする。図11は、同位体比0.7%のUF₆（天然同位体比）50Kの時の、²³⁵UF₆ Qブランチ周辺である。²³⁵UF₆ Qブランチは²³⁸UF₆のRブランチに挟まれており、はっきりと区別することができる。幅の拡がりにより細かい構造は見えなくなるが、 0.01 cm^{-1} でもRブランチの裾に重なる程度である。重なり具合が増えると励起される分子は²³⁵UF₆と²³⁸UF₆の混合物になり、²³⁵Uだけを分離する上では望ましくない。

もっと強いレーザー光により幅が広がった場合、²³⁸UF₆のRブランチだけではなく、Qブランチも影響するかもしれない。図12は更に広い幅を持つQブランチの拡がりも示したものである。 0.1 cm^{-1} 程度の幅を持たせると、²³⁵UF₆、²³⁸UF₆のQ

ブランチの裾が重なり始め、 0.6cm^{-1} ではかなり影響が出てくる。ここでは同位体比を50%にしているが、 $^{235}\text{UF}_6$ Qブランチのピーク波長では少なくとも20%の $^{238}\text{UF}_6$ が重なってくる。

最後に、P、Rブランチも含めた、スペクトルの重なりだけから同位体比を計算したものを図13に示す。相対的解離率は最大を100とし、 $^{235}\text{UF}_6$ 同位体比は吸収強度の百分率で表した。天然同位体比では大部分が $^{238}\text{UF}_6$ であるため、ほとんどの波長で $^{235}\text{UF}_6$ は濃縮されない。しかし、最も強度の大きい $^{235}\text{UF}_6$ Qブランチ付近では、 $^{238}\text{UF}_6$ のRブランチの強度が小さくなるために分布が逆転し、図のように90%程度まで濃縮されることになる。赤外多光子解離の第1段階である励起過程では、このように $^{235}\text{UF}_6$ Qブランチに波長を合わせる必要があることが示された。

4. まとめ

UF_6 ν_3 の振動・回転スペクトルのシミュレーションを行い、スペクトルの回転温度依存性、吸収線形状、幅の依存性を調べた。また、吸収線幅の原因となる分子衝突拡がり、ドップラー拡がり、レーザー光によるパワー拡がりを計算し、Qブランチの形状や同位体を含むスペクトルの変化を調べた。さらに、これらの計算結果を基に相対的解離率と分離の効率について計算した。その結果、以下の結論を得た。

- (1) サブバンドヘッドの強度を比較することにより、回転温度のおおよその値を得ることができる。
- (2) 考慮したスペクトル幅の拡がりは、衝突拡がり<ドップラー拡がり<パワー拡がりであり、吸収スペクトル測定時ではドップラー拡がりが効くが、多光子解離過程を引き起こすような強い光ではパワー拡がりが優勢となる。
- (3) 極低温において、 $^{238}\text{UF}_6$ Rブランチと明確に分離している $^{235}\text{UF}_6$ Qブランチも、レーザーパワー拡がりによってブロードなスペクトルに変化し、分離の効率が低下する。
- (4) スペクトルの重なりだけが分離過程となる簡単な仮定のもとでは、 $^{235}\text{UF}_6$ Qブランチに対応する波長が最も効果的である。

5. 参考文献

- (1) W. G. Harter, Phys. Rev. A, 24(1), 192(1981)
- (2) J. Moret-Bailly, J. Mol. Spectrosc., 15, 344(1965)
- (3) H. W. GALBRAITH, C. W. PATTERSON, B. J. KROHN, J. Mol. Spectrosc., 73, 475(1978)
- (4) K. FOX, W. B. PERSON, J. Chem. Phys., 64, 5218(1976)
- (5) C. D. CANTRELL, H. W. GALBRAITH, J. Mol. Spectrosc., 58, 158(1975)
- (6) R. Loudon, "The quantum theory of light", 2nd ed., Clarendon press, Oxford(1983)
- (7) R. DEWITT, "Uranium Hexafluoride: A Survey of the Physico-Chemical Properties", GoodYear Atomic Corporation, Portsmouth, Ohio, 1960
- (8) E. G. BROCK, B. J. KROHN, R. S. MCDOWELL, C. W. PATTERSON, J. Mol. Spectrosc., 76, 301(1979)
- (9) M. TAKAMI, et. al., Japan. J. Apl. Phys., 23, L88(1984)
- (10) J. P. ALDRIDGE, et. al., J. Chem. Phys., 83, 34(1985)

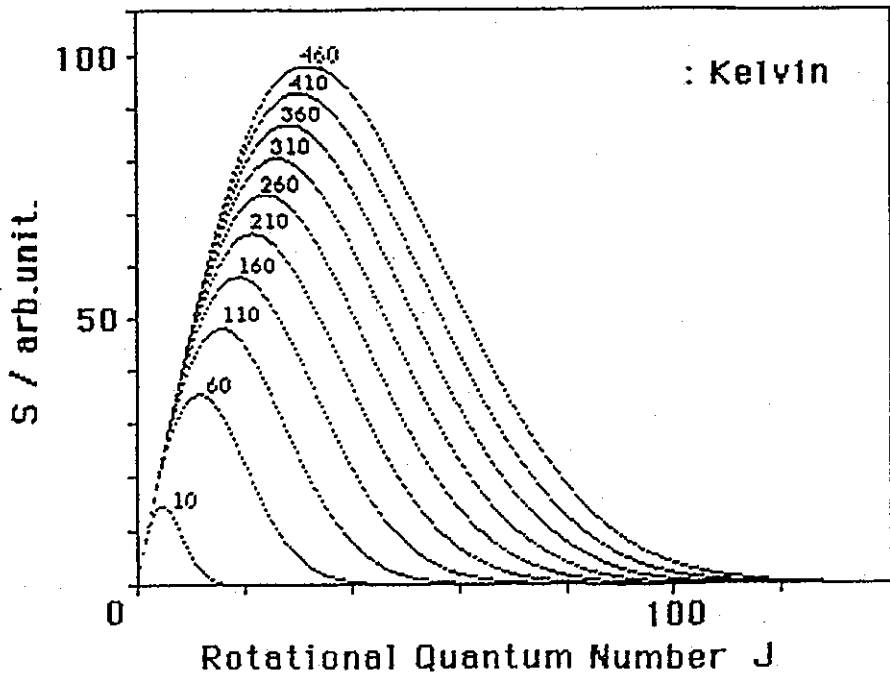


図 1. 回転量子数 J と温度に対する吸収強度の変化

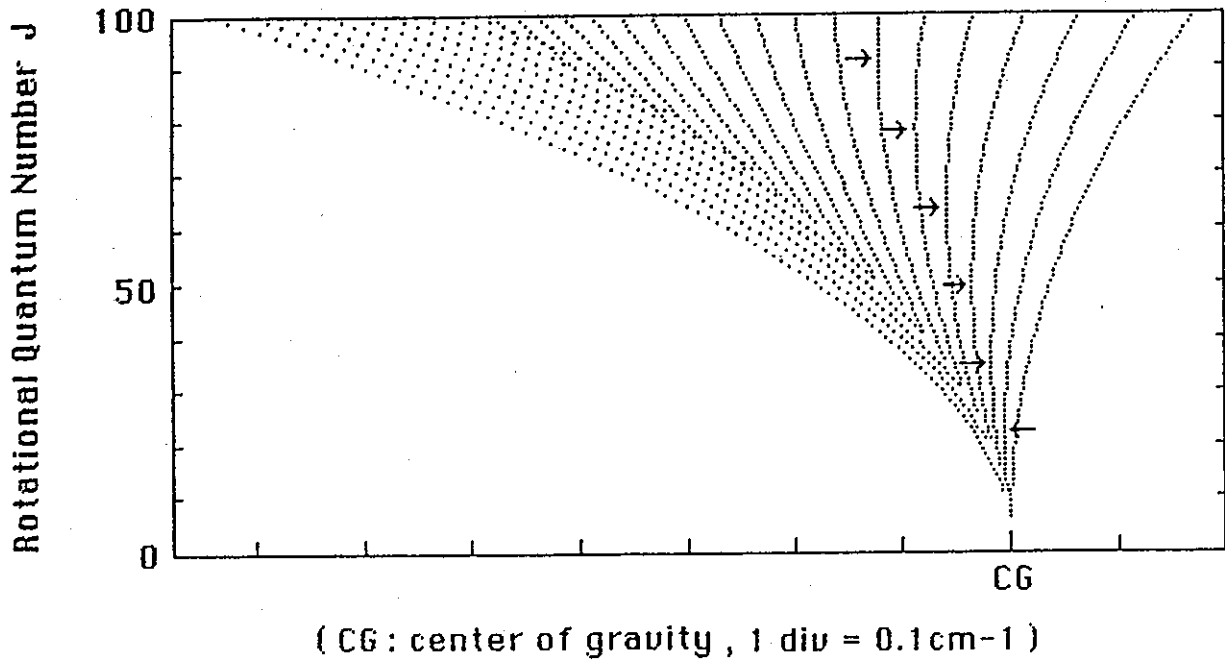


図 2. U F_g ν₃ Q ブランチ吸収線の位置

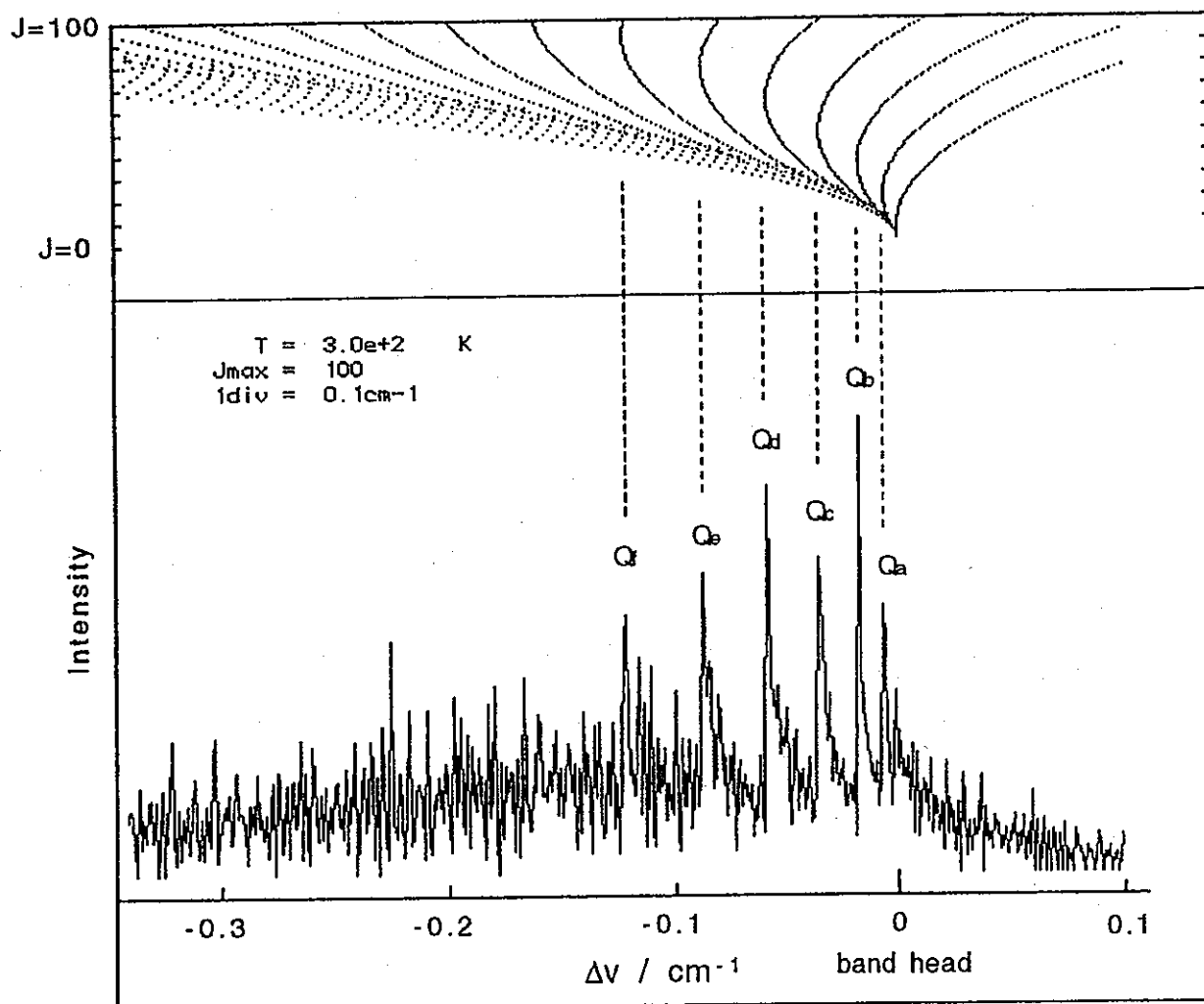
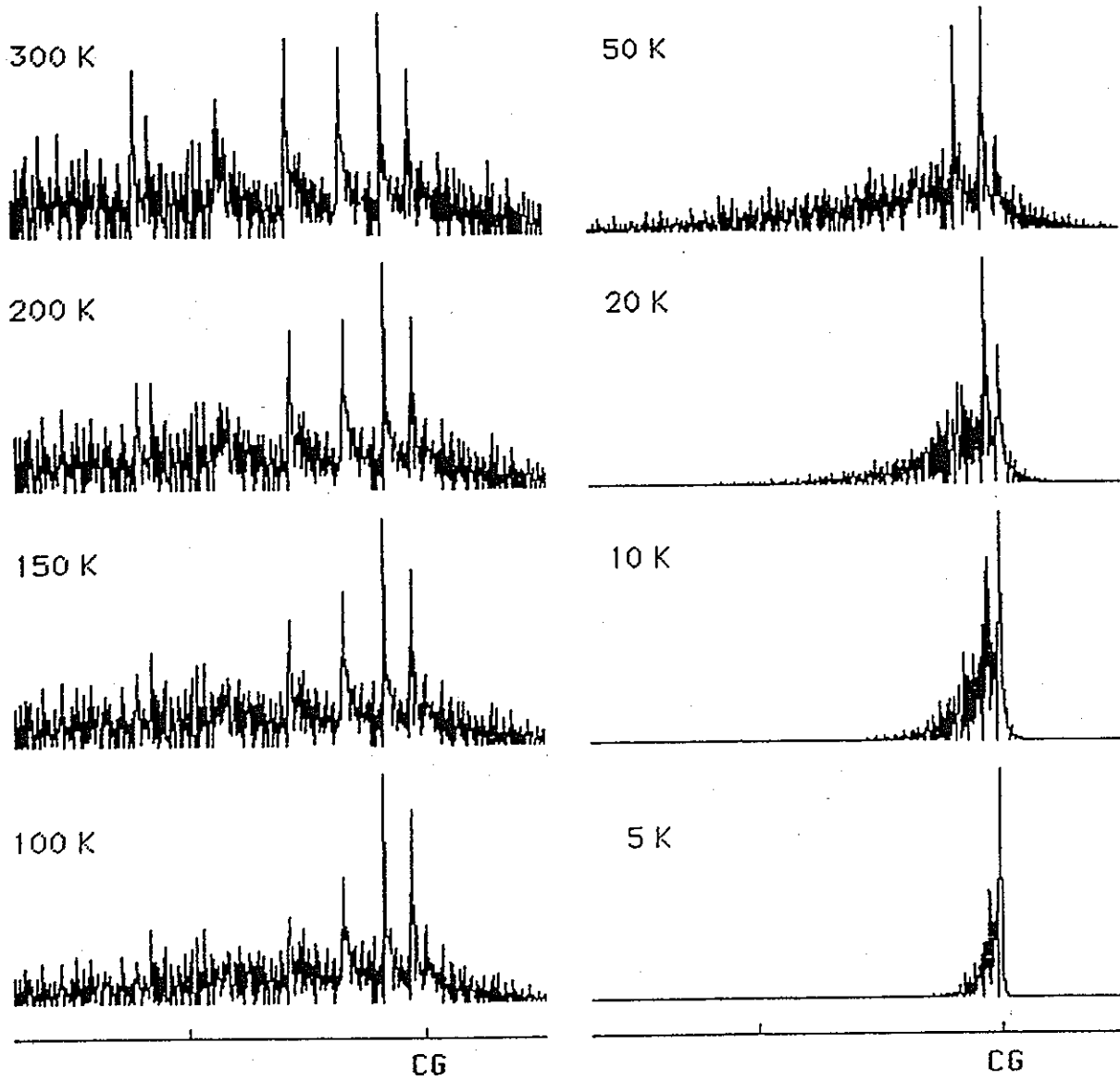


図3. UF_6 Q ブランチのスペクトルシミュレーション



CG : Center of Gravity , 1 div = 0.1 cm⁻¹

図 4 . 回転スペクトルの温度による変化

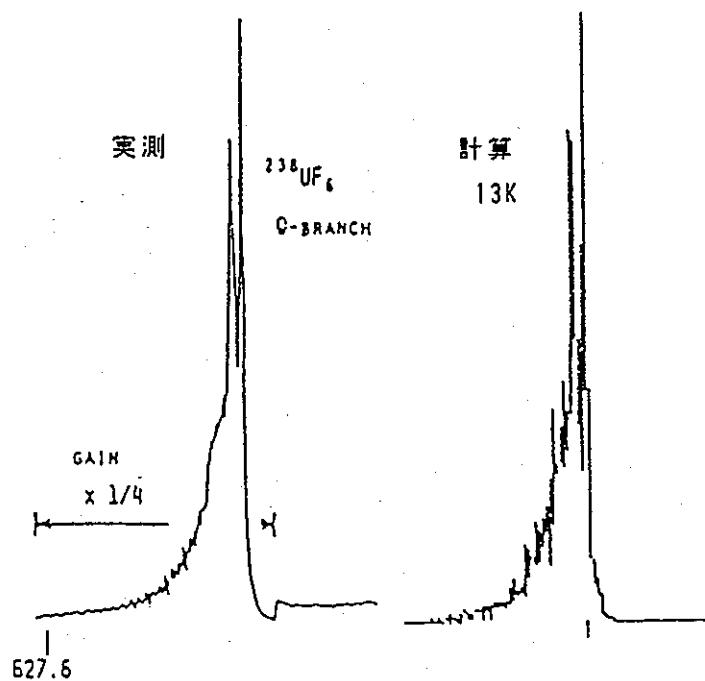


図5. 実験結果との比較 (実験はTAKAMIらによる)

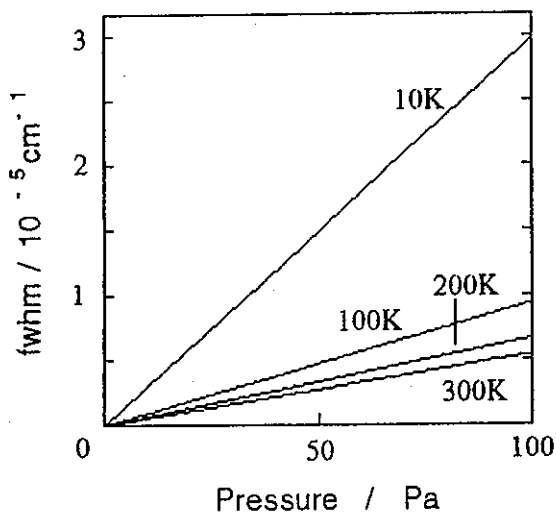


図6. 圧力と温度に対する拡がりの変化

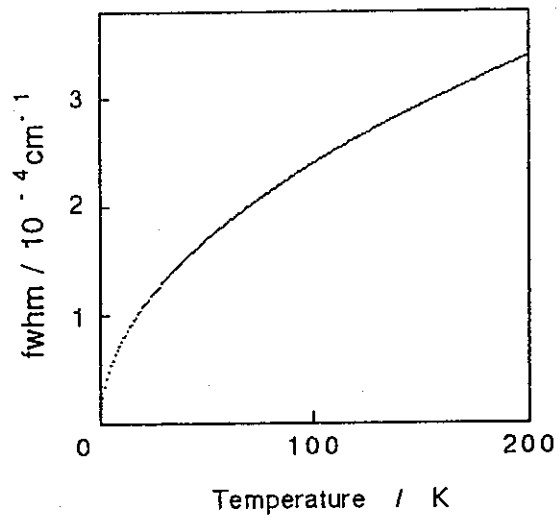


図7. ドップラー拡がりの温度依存性

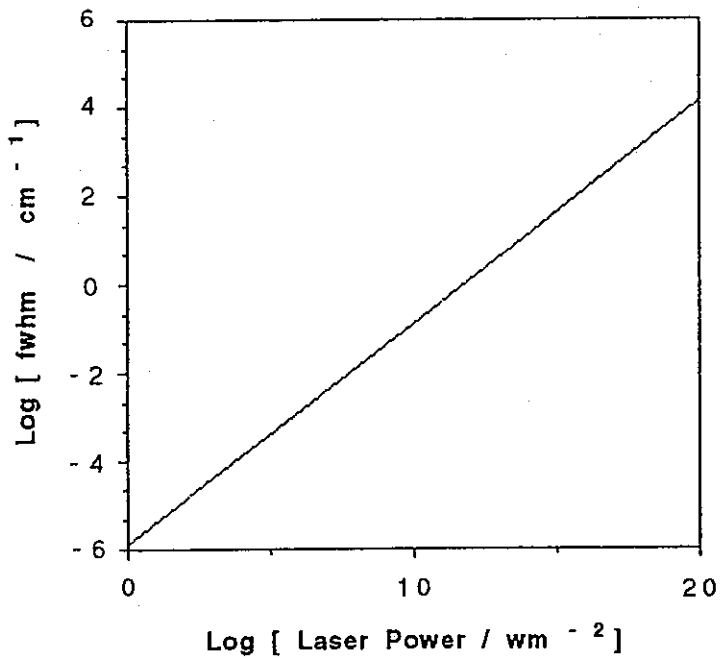


図8. 吸収線幅のレーザーパワー依存性

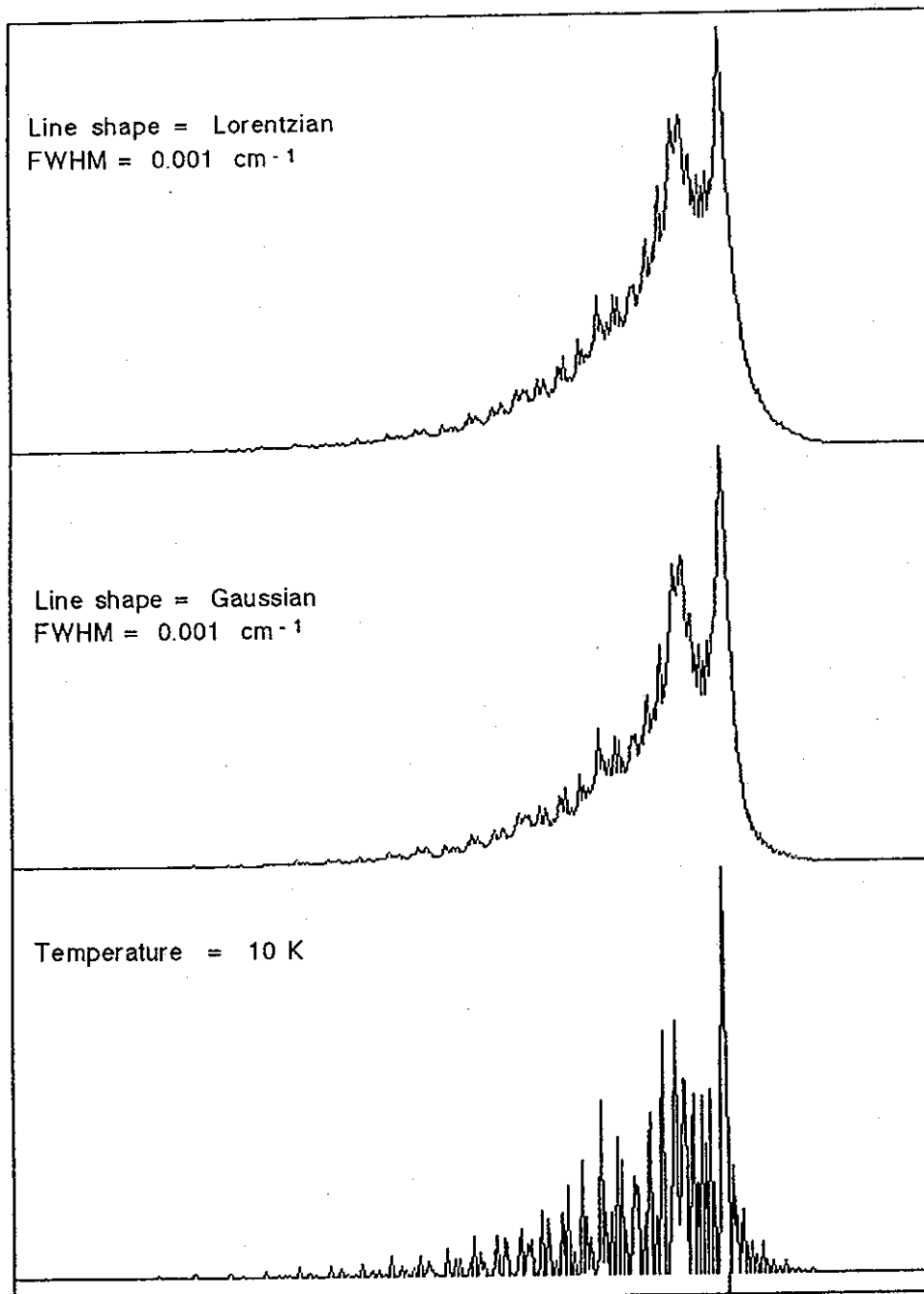


図9. 幅を考慮したQブランチスペクトル (10K)

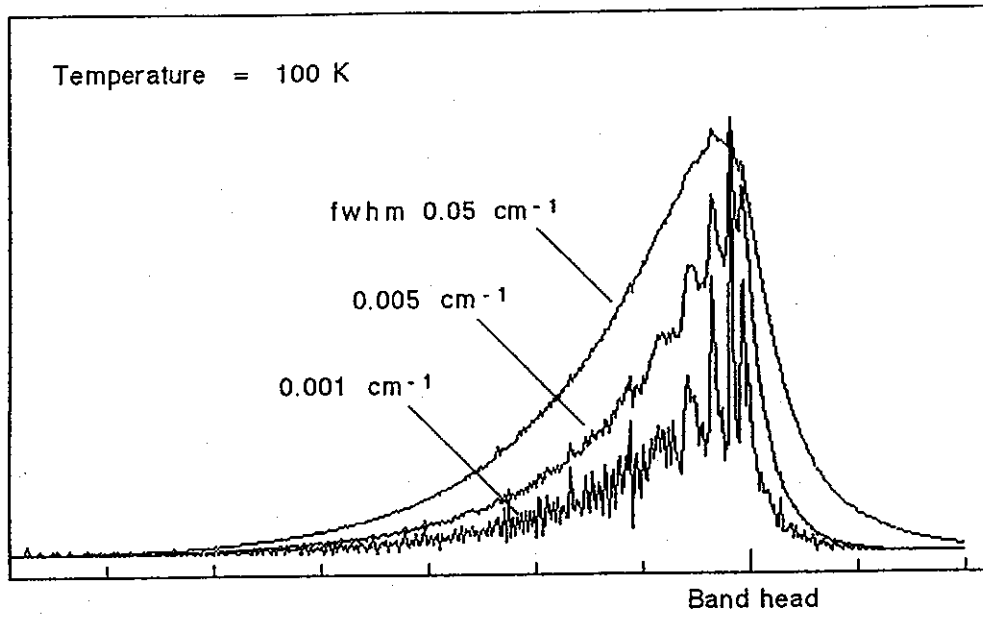


図10. スペクトル幅を変えた時のQブランチの変化

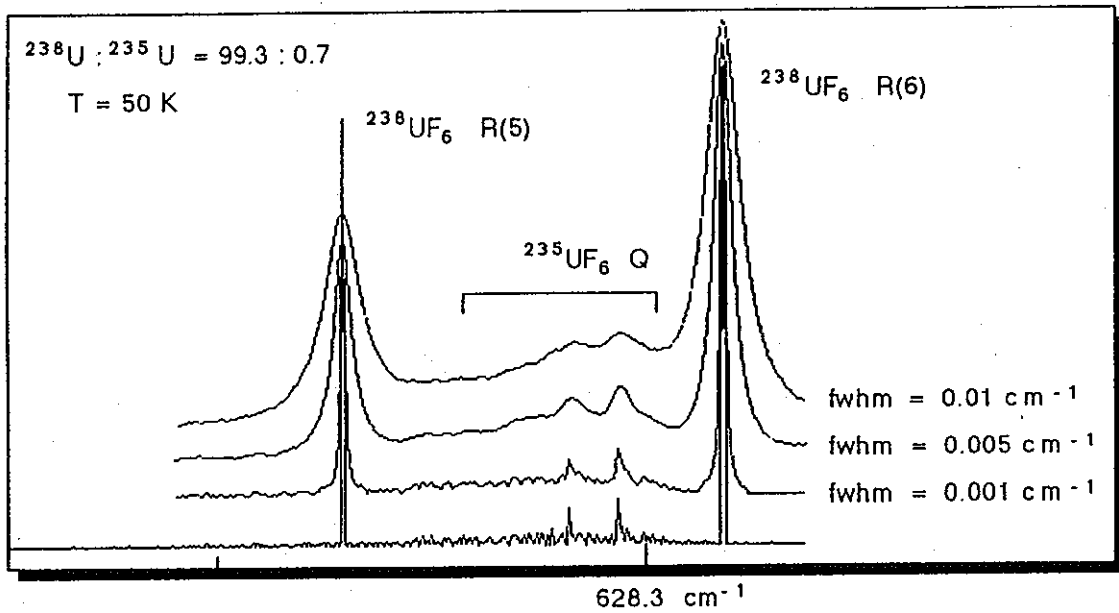


図11. ²³⁵UF₆Qブランチのスペクトル幅による変化

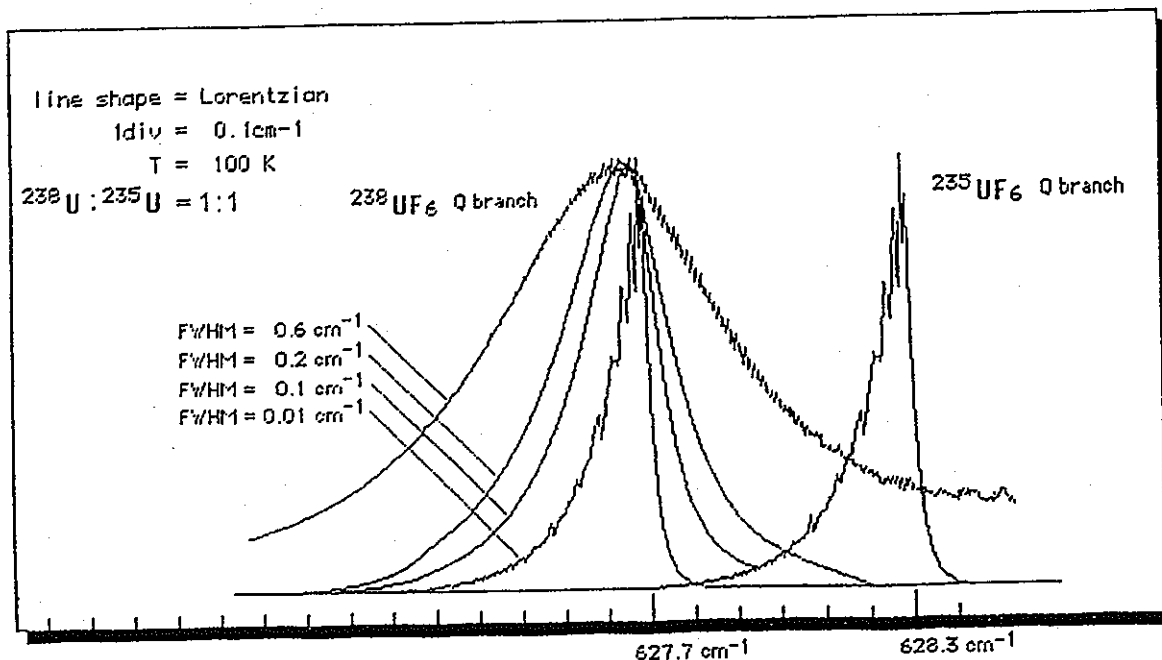


図12. 広いスペクトル幅を持った場合のQブランチの比較

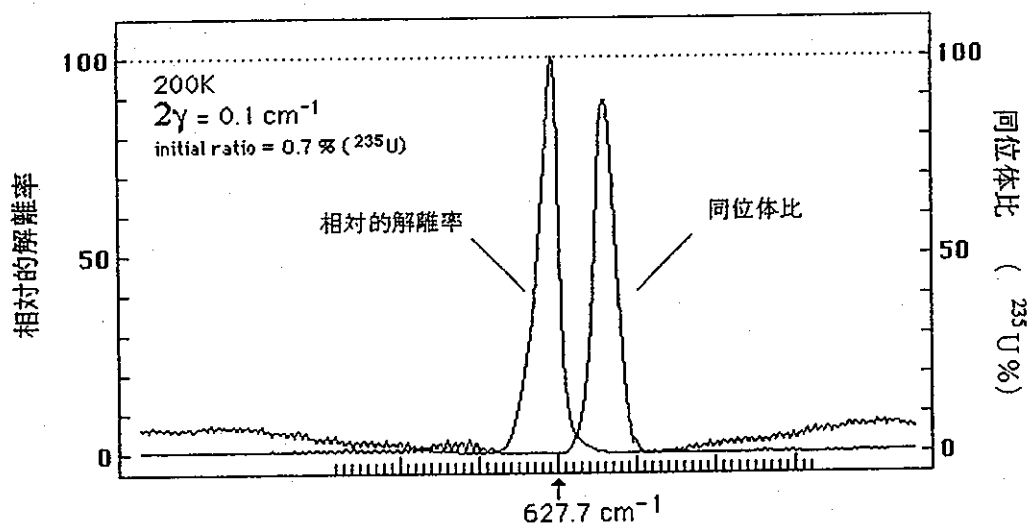


図13. 解離率、同位体比の波長依存性