

CaOH 自由基 $A^2\Pi-X^2\Sigma(100)-(000)$ 及 $(020)-(000)$

跃迁的激光激发荧光光谱

李明光 王崇业 张一 朱清时

(中国科学院青海盐湖研究所)

CaOH 自由基的光谱研究已有很长的历史。最近, 它的 $A^2\Pi-X^2\Sigma(000)-(000)$ 跃迁的高分辨率激光激发荧光光谱已被研究, 由此得出的数据正被用于在星际空间(Sagittarius B₂) 中搜索 CaOH 的微波吸收信号。本文研究其 $A^2\Pi-X^2\Sigma(100)-(000)$ 及 $(020)-(000)$ 跃迁的高分辨率光谱。

我们建立了一个氩气运载的流动金属蒸气系统(Broida Oven)。让水蒸气与低压流动的氩气中运载的 Ca 原子反应生成 CaOH, 其浓度由化学荧光监测。

CaOH 已证明是线性分子, 其弯曲振动频率约为对称伸缩振动频率的一半, $2\omega_2 \approx \omega_1$, 因此, $(100)-(000)$ 和 $(020)-(000)$ 跃迁在 5998~6031 Å 区域重迭。其中 $(020)-(000)$ 跃迁仅由于与延伸模的费米共振而具有可观的强度。

使用单模环路染料激光器扫描, 得到了这些跃迁的电子-振-转光谱, 其绝对频率由 I₂ 标准谱线算出。每条转动线的 J 值由测量相应的 P-R 跃迁的间距推算出。 $^2\Pi$ 态的能级(Case(a)) 为:

$$F_{1c}(J) = T_v - A_{v/2} + B'_v \left(\Omega = \frac{1}{2} \right) J(J+1) - D'_v \left(\Omega = \frac{1}{2} \right) J^2 (J+1)^2 - \frac{P_r}{2} \left(J + \frac{1}{2} \right) \quad (1)$$

$$F_{1d}(J) = T_v - A_{v/2} + B'_v \left(\Omega = \frac{1}{2} \right) J(J+1) - D'_v \left(\Omega = \frac{1}{2} \right) J^2 (J+1)^2 + \frac{P_r}{2} \left(J + \frac{1}{2} \right) \quad (2)$$

$$F_{2c}(J) = F_{2d}(J) = T_v + A_{v/2} + B'_v \left(\Omega = \frac{3}{2} \right) J(J+1) - D'_v \left(\Omega = \frac{3}{2} \right) J^2 (J+1)^2 \quad (3)$$

$^2\Sigma$ 态(Case (b)) 的能级为:

$$F_1(N) = B_v'' N(N+1) - D_v'' N^2(N+1)^2 + \frac{\gamma_v''}{2} N \quad (4)$$

$$F_2(N) = B_v'' N(N+1) - D_v'' N^2(N+1)^2 - \frac{\gamma_v''}{2} (N+1) \quad (5)$$

把测得的跃迁频率和相应的量子数代入上述公式, 进行最小二乘方拟合, 得出了相应的分子常数。