

Title	高分解能レーザー光電子分光法によるベンゾニトリル および 1,2,4,5-テトラフルオロベンゼンの研究
Author(s)	池田, 健一
Citation	
Issue Date	1997-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	http://hdl.handle.net/10119/2339
Rights	
Description	Supervisor:木村 克美, 材料科学研究科, 修士

高分解能レーザー光電子分光法によるベンゾニトリル および 1,2,4,5-テトラフルオロベンゼンの研究

池田 健一 (木村研究室)

【序論】 二波長レーザー共鳴イオン化におけるゼロ運動エネルギー (ZEKE) 光電子の測定によって、分子カチオンの高分解能スペクトルが得られる。ここでは、1,2,4,5-テトラフルオロベンゼン (以下 TFB という) のカチオンについて報告する。TFB はベンゼン環に 4 つの F 原子が結合した分子構造をしている。中性基底状態 (S_0) から電子励起一重項状態 (S_1) に遷移すると TFB は 4 つの F 原子が 2 組のペアとなり、ちょうどチョウが羽をはばたかせるような格好 (バタフライ振動) で面外に反った形で安定になる。 S_1 でのポテンシャルエネルギー曲線は 2 つの最小点をもつ「ダブルミニマム構造」をしており、この 2 つの安定な平衡点の間でトンネル効果によりバタフライ振動が生じると考えられている。本研究では ZEKE 光電子分光法によりカチオン振動スペクトルを測定した。また *ab initio* 分子軌道計算法を用いて分子の構造最適化と振動力場計算を行ない、スペクトルの解釈を行なった。なお、ベンゾニトリルカチオンについても詳しい結果が得られたが、ここでは省略する。

【実験ならびに計算】 真空度が約 2×10^{-6} Torr の真空チェンバー内に、キャリアガス Ar 1 atm でシードした TFB を超音速ジェットとして導入した。同時に Nd:YAG レーザーを光源とした 2 台の波長可変色素レーザーの倍波を励起光 (ν_1) およびイオン化光 (ν_2) としジェットに照射した。放出した ZEKE 光電子をパルス電場イオン化により捕捉し、 ν_2 を波長掃引し ZEKE 光電子スペクトルを得た。*ab initio* 分子軌道計算には Gaussian 94 プログラム (UHF 法) を用い、基底関数は構造最適化および振動計算ともに 6-31G* を用いた。

【結果と考察】 TFB のオリジン経由の ZEKE 光電子スペクトルを示す (修論参照)。測定の結果断熱イオン化ポテンシャルは $75638 \pm 3 \text{ cm}^{-1}$ であった。 D_0 オリジンから等間隔 (約 354 cm^{-1}) で現われる振動プログレッションを 11^{+2n} ($n=1,2,3,4$) と帰属した。このプログレッションは他のバンドを原点としても多数現われている。ZEKE スペクトルで 11^{+2n} が等間隔のプログレッションを示すことから、 D_0 においてこのモードが調和的であり、カチオン分子は平面形をとることが分かった。

図は 平成 8 年度修士論文研究発表要旨集参照

keywords

ZEKE 光電子分光, バタフライ振動, ダブルミニマムポテンシャル