

レーザー脱着法による多環芳香族炭化水素の
ペニングイオン化電子分光
東北大理 ○山内雅世・岡村浩司・山門英雄・大野公一

Penning Ionization Electron Spectroscopy of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons by Laser Desorption
(Faculty of Science, Tohoku University)

Yamauchi, Masayo; Okamura, Kohji; Yamakado, Hideo; Ohno, Koichi

<序> 芳香族炭化水素は昇華性の低いものが多く、従来気相での電子分光の際には試料を気化させるために長時間（数時間以上）加熱する必要があった。しかし、今回レーザー脱着法を用いることにより短時間（数分以内）で気相のアントラセンおよびコロネンのペニングイオン化電子スペクトルを測定することができた。

<実験> 金属板上の固体試料にYAGレーザーの2倍波（532nm,170mJ/pulse）を照射して試料を気化しHe⁺（2³S）によるペニングイオン化電子スペクトルを測定した。

<結果と考察> 図1に今回測定したアントラセンのペニングイオン化電子スペクトルと、従来の方法によって測定したスペクトルを示す。ペニングイオン化電子スペクトルにおいて強調される7つのπバンドが観測され、従来のスペクトルと一致していることがわかる。また、熱による分解生成物も特に観測されなかった。さらに、この方法によって、図2に示すように、初めて気相コロネンのペニングイオン化電子スペクトルを測定することができた。ペニングイオン化電子スペクトルにおいては、σバンドに比べてπバンドが強調される特徴があるので、UPSの帰属が難しい場合にもπバンドを特定することができる。表にUPS,PIESに基づいたコロネンのπバンドのIPの実測値とab initio 4-31G基底による計算値を示した。π₃からπ₅までのバンドはUPSで観測されているバンドと対応づけられ、新たにπ₁,π₂軌道に対応するバンドを観測することができた。このようにレーザー脱着法は、不揮発性物質の気相電子分光に有用であることがわかった。

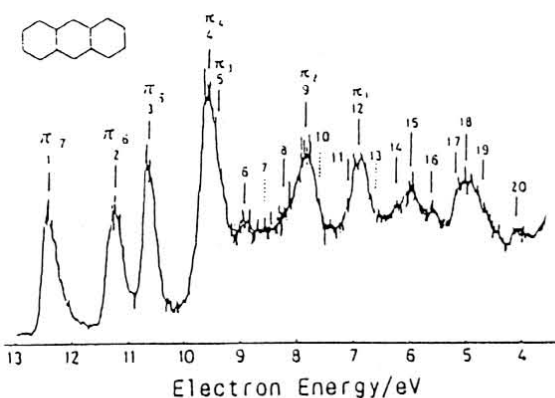
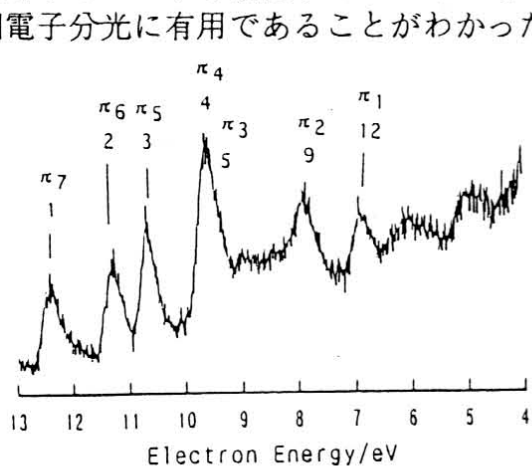


図1 レーザー脱着法によるアントラセンのペニングイオン化電子スペクトル（上）と従来の方法によるスペクトル（下）

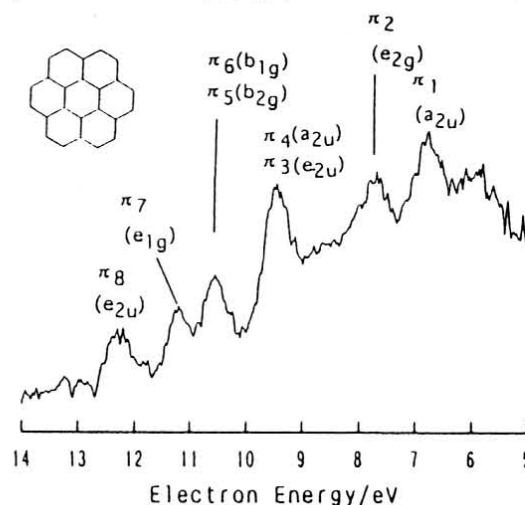


図2 コロネンのペニングイオン化電子スペクトル

表 コロネンのIP値とバンドの帰属

band	IP/ eV		
	UPS ^{a)}	PIES	calc./4-31G
π ₈	7.36	7.5	6.80
π ₇	8.65	8.6	9.03
π ₆ , π ₅	9.19	9.3	9.58, 9.68
π ₄ , π ₃	10.4	10.4	12.18, 12.45
π ₂	—	12.2	15.19
π ₁	—	13.1	16.19

a) R.Boschi, E.Clar and W. Schmidt
J. Chem. Phys., 60,4406(1974)