

アクロレインの速度分解ペニングイオン化電子分光

(東北大理・東大教養) ○岡村浩司・山内雅世・山門英雄・大野公一

Collision Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectra of Acrolein

(Faculty of Science, Tohoku University,

and College of Arts and Sciences, the University of Tokyo)

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

『序』 ヘリウムの準安定励起原子 $\text{He}^*(2^3\text{S})$ と分子の衝突に伴うペニングイオン化反応において、部分イオン化断面積の衝突エネルギー依存性(CEDPICS)を測定することにより、分子と He^* との相互作用ポテンシャルについての情報を得ることができる。今回は、共役カルボニル化合物であるアクロレインを取り上げた。

『実験』 UPS、PIES、およびCEDPICSの測定は既報の装置[1]を用いた。

『結果と考察』 アクロレインのUPSとPIESを図1に、CEDPICSを分子軌道の模式図とともに図2に示す。図2で大きな右下がりのバンド1、4、6は、カルボニル酸素原子近傍に電子分布の広がりを持つ分子軌道(n_{O} 、 σ_{CO})に対応しており、酸素原子近傍は He^* と強い引力的な相互作用をすることがわかる。その中でも、分子表面の外側に電子密度が大きくはみ出している σ_{CO} 性の分子軌道に対応するバンド4、6は、PIESで強い強度を示している。また、分子平面に垂直な π_{CO} 軌道、およびビニル基の σ_{CH} 軌道に対応するバンド3のCEDPICSは緩い右下がりであり、 π_{CO} 軌道の電子が分布する領域も、 He^* に対して引力的に作用することが示唆される。そして、これらのPIESのバンドはUPSに比べ、低電子エネルギー側にシフトしている。それに対し π_{CC} 性のバンド2はシフトしておらず、CEDPICSの傾きは緩く、それほど強い引力は認められない。また、アクロレインのUPSには *ab initio* 計算から求められる分子軌道のどれにも対応しない弱いバンド5が見いだされたが、これは、 π 軌道のイオン化と同時に π 軌道から π^* 軌道への励起が起こる電子相関によるものと考えられる。

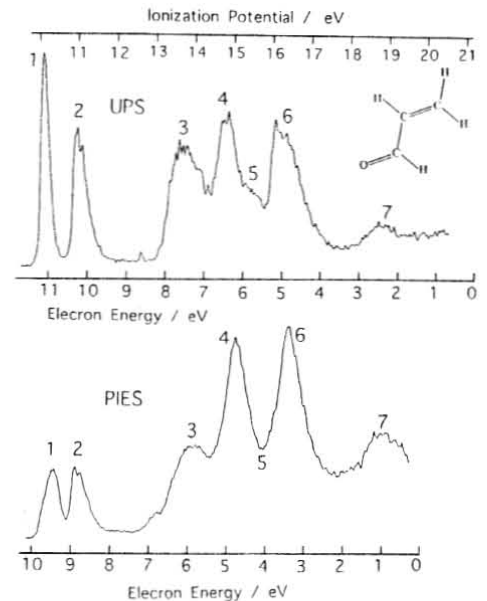


図1 アクロレインのUPSとPIES

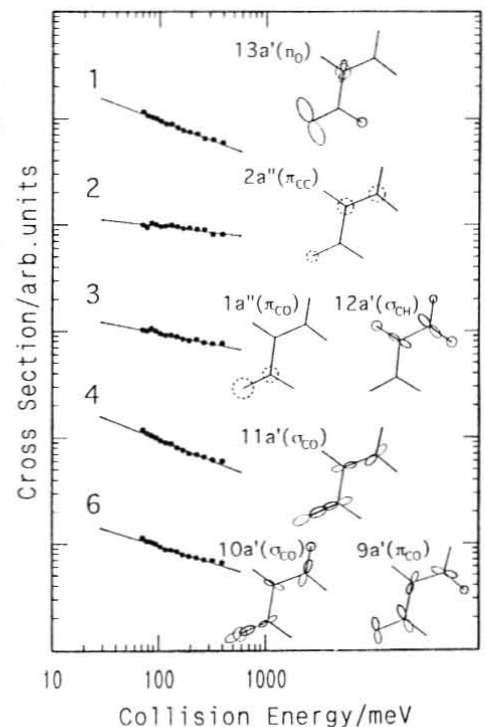


図2 アクロレインのCEDPICS

[1] K. Ohno et al., *J. Chem. Phys.*, 94, 2675 (1991)