

環状エーテル類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) ○山内雅世、岡村浩司、山門英雄、大野公一

Collision Energy Resolved Penning Ionization Spectroscopy for Cyclic Ethers with He*2³S

Faculty of Science, Tohoku University, and College of Arts and Sciences, the University of Tokyo

Yamauchi Masayo; Okamura Kohji; Yamakado Hideo; Ohno Koichi

<序> He* (2³S) と分子の衝突に伴うペニングイオン化過程において、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って分子とHe*の相互作用ポテンシャルに関する情報を得ることができる。以前の研究から、直鎖のアルコールやエーテル類は酸素原子近傍ではHe*と引力的な相互作用をすることが見い出されている。ここでは、酸素原子近傍の相互作用領域が立体的に固定されると考えられる環状エーテル類について測定し、おもに酸素原子近傍の引力ポテンシャルについて考察した。

<実験> 実験は既報の装置を用いて行った。放電により生成したHe*ビームをチョッパーでパルス化して飛行時間に依存した放出電子の強度をエネルギー選別して測定した。

<結果と考察> 図1にテトラヒドロピランの紫外光電子スペクトル(UPS)とペニングイオン化電子スペクトル(PIES)を示す。図2にはCEDPICSと対応する軌道の電子密度マップを示した。図より、酸素の非結合性軌道(n_o)は酸素原子近傍に大きなEED (Exterior Electron Density)を持ち、対応するイオン化状態(バンド1)のCEDPICSは大きな負の傾きを示すことから、酸素原子近傍でのHe*との相互作用ポテンシャルは引力的であることがわかる。さらにPIESでのピークが低エネルギー側にシフトしていることから引力的ポテンシャルであることが裏付けられる。逆にバンド8の σ_{CO} 軌道のように分子の内側に電子密度が集中している場合には特定方向からのHe*の衝突が大きく寄与するということがないためCEDPICSはフラットでPIES強度も小さい。バンド12に対応する軌道は σ_{CH} 性をもつが酸素原子近傍にも電荷分布を持ち、PIESで特に強いピークを示す。バンド13はC 2s成分を含む軌道に対応し、高いPIES強度とCEDPICSの正の傾きが特徴的である。これらの傾向は1, 4-ジオキサン、テトラヒドロフランについても同様に観測された。このようにCEDPICSを測定し、スペクトルのピーク位置や強度分布の考察をあわせると、分子間相互作用ポテンシャルに関する情報を得ることができ、さらにUPSの帰属にも役立つことができる。

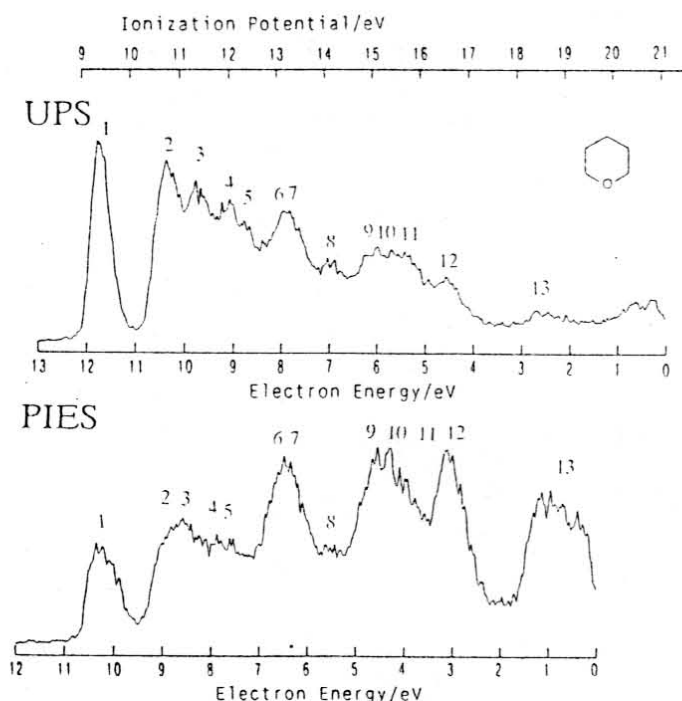


図1 テトラヒドロピランのUPSとPIES

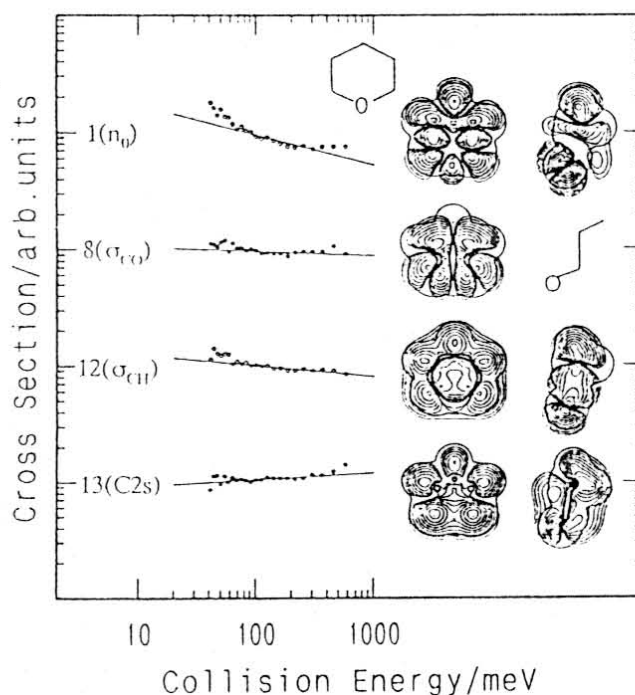


図2 テトラヒドロピランのCEDPICS