

ナフタレンを含む混合クラスターイオンの電子スペクトル

(九大理) ○井口 佳哉・松本 政樹・大橋 和彦・西 信之

【はじめに】質量選別光解離分光法は、クラスターイオンの分光学的情報を得る有力な手段である。この分光法の詳細は次の通りである。まず、孤立気相状態において質量選別したイオンにレーザー光を照射する。クラスターイオンは低波数の振動モードの存在により通常の分子より状態密度が高く、励起状態からの解離の確率が非常に大きい。もし、レーザー光のエネルギーが励起状態に共鳴すると励起分子数が増加し、それに伴い解離生成物の収量が増大することになる。解離生成物の収量をモニターしながらレーザー波長を変化させることにより、目的のサイズのイオンについてほぼ従来の吸収スペクトルに相当する光解離スペクトルを得ることができる。我々はこれまでにベンゼンダイマーカチオン (B_2^+)、ナフタレンダイマーカチオン (N_2^+) などの光解離スペクトルを測定しその電子状態、構造を明らかにしてきた。本研究では、ナフタレン-ベンゼン混合ダイマーカチオン (NB^+) の光解離スペクトルを観測したので報告する。また、このスペクトルから混合クラスターイオンの電子状態、正電荷分布について議論する。

【実験】図1に実験装置を示す。ベンゼン、ナフタレン、アルゴンの混合ガスを直径0.8 mmの小孔を通して真空槽内に導入し、レーザーにより誘起したプラズマ中を通過させてイオン化した。生成した NB^+ を第一の四重極質量分析計で選別し、イオンベンダーによって90°方向転換後、オクタポールイオントラップ中に捕捉した。オクタポールと同軸状にレーザー光を導入してトラップしたイオンを光励起し、それに伴い解離生成するナフタレンモノマーカチオンを第二の四重極質量分析計により検出した。励起光の波長に対し、ナフタレンモノマーカチオンの収量をプロットすることにより NB^+ の光解離スペクトルを得た。

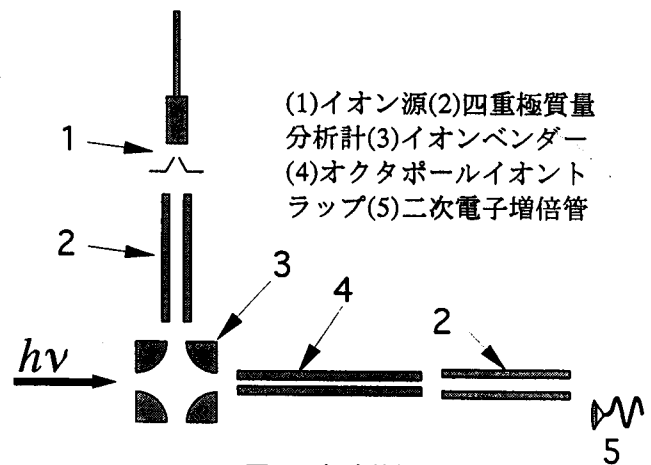


図1 実験装置図

【結果と考察】図2に NB^+ の光解離スペクトルを示す。 B_2^+ 、 N_2^+ の研究から、この波長領域の吸収帯はダイマーカチオン中のモノマーカチオンユニットを励起した局所励起吸収帯 (Local excitation band, LE) であることがわかっている。ナフタレン分子のイオン化ポテンシャルはベンゼンより約1.1 eV小さく、 NB^+ の電子基底状態はナフタレン側に正電荷の局在した (N^+)B型であると予想される。もし (N^+)B型であれば光解離スペクトルにはナフタレンモノマーカチオン励起の LE のみが見られ、ベンゼンカチオン由来の LE は出現しないはずである。しかし、実際観測された NB^+ の光解離スペクトルではナフタレンカチオンの LE (580 nm) に加えベンゼンカチオンの LE (420 nm) も観測された。このことから、 NB^+ の電子基底状態においては (N^+)B だけでなくベンゼン側に正電荷が分布した $N(B^+)$ の存在も明らかとなった。また近赤外領域において、 $N(X)+B^+(X)$ に相関する励起状態への遷移が観測された。この遷移エネルギーとイオン化ポテンシャルの差から、ベンゼン側、ナフタレン側における正電荷の存在確率の定量的な情報が得られるが詳細は当日述べる。

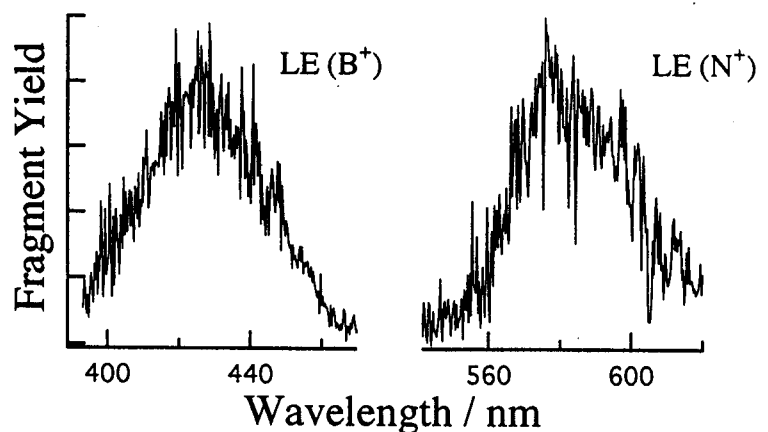


図2 NB^+ の光解離スペクトル