

フェノール・ベンゼン混合ダイマーイオンの振動・電子スペクトルの観測

(分子研・イリノイ大) ○井口佳哉・西信之・Jim M. Lisy

【序】これまでの研究によりフェノール・ベンゼン混合ダイマーイオンの2つの芳香環はベンゼンダイマーイオンの様な平行構造をとっておらず、正電荷はフェノール側に局在していることがわかっている。このダイマーイオンの構造に関するより直接的な知見を得るには赤外光解離スペクトルの観測が有力である。本研究ではこのダイマーイオンについて赤外光解離スペクトルを観測してその構造の詳細を検討した。また可視・紫外光解離スペクトルを観測しその電子状態と構造との関係を明らかにすることを試みた。

【実験】電子衝撃イオン化によって生成したフェノール・ベンゼン混合ダイマーイオンを第一の四重極質量分析計により選別後イオンガイドへと導入し、赤外・可視・紫外レーザを照射する。光励起に伴い解離生成するフェノールイオンを第二の四重極質量分析計により質量選別し、二次電子増倍管により検出する。このフェノールイオンの収量をレーザ光の波長に対してプロットすることによりフェノール・ベンゼン混合ダイマーイオンの光解離スペクトルを得た。測定では2種類のイオン源を使用し、スペクトルの相違を観測した。

【結果と考察】図1に振動スペクトルを示す。図1(a)と(b)では使用したイオン源が異なり、(a)は(b)より低温であると考えられる。図1(a)では 3239 cm^{-1} にのみ極大が観測された。それに対し図1(b)では 3060 cm^{-1} と 3210 cm^{-1} の二つの極大が観測され、これは以前に三上らによって報告されたスペクトルとほぼ同じである[1]。これらはすべてOH伸縮振動と帰属することができ、図1(b)の2つの極大は2種類の異性体(1)、(2)に対応していると考えられる。OH伸縮振動の振動数より、異性体(1)は異性体(2)に比べ強く水素結合していると考えられる。高温のイオンではじめて異性体(1)が観測されたことより異性体(1)は(2)に比べわずかに不安定であることがわかる。図2に電子スペクトルを示す。図

2(a)はフェノールイオンの吸収と類似しているのに対し、高温のイオンでは C_6H_7^+ あるいは $\text{C}_6\text{H}_5\text{O}$ の吸収帯に類似の構造が観測され、高温ではOH基の水素原子がベンゼンとより強く結合した構造を取りうると思われる。

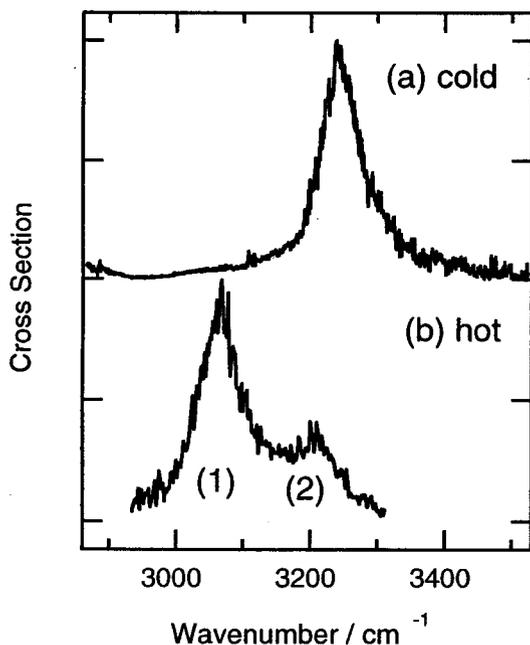


図1 振動スペクトル

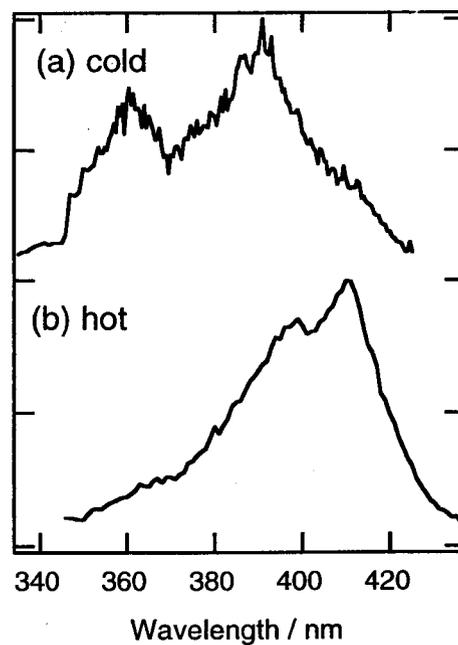


図2 電子スペクトル

[1] A. Fujii, A. Iwasaki, K. Yoshida, T. Ebata, N. Mikami, *J. Phys. Chem. A* 1997, 101, 1798.