

Title	ベンゼン置換体カチオンのレーザー分光および分子軌道計算による研究
Author(s)	山井, 克紘
Citation	
Issue Date	1996-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	http://hdl.handle.net/10119/2247
Rights	
Description	材料科学研究科, 修士

ベンゼン置換体カチオンのレーザー分光 および分子軌道計算による研究

山井克紘 (木村研究室)

はじめに 近年、超音速ジェットにより冷却された分子を多光子共鳴イオン化し、しきい光電子(運動エネルギーがゼロ)を検出するしきい光電子分光法(*REMPI-ZEKE*)が開発された。当研究室ではこの分光法により、さまざまな分子の分子振動、構造など研究すると同時に、半経験的分子軌道法(*MOPAC ver6.20*)により得た最適化構造の分子力場を基にした基準振動計算による結果を参照し実験結果を検討している。本研究室では、ベンジルアルコール、オルトクロロフェノール、*NO*を対象に実験を行なった。また *NO*に関しては、高リユードベリ状態 $A^1\Sigma^+$ の寿命測定を行なった。以下にベンジルアルコールについての結果と考察を述べる。

計算方法 CH_2OH 基をもつベンジルアルコールは図1(a)に示してあるように $C-C$ 結合と $C-O$ 結合の2つの分子内回転軸をもつ。本研究では、これらの回転異性体の安定構造を半経験的分子軌道法により求めた。計算は $C-C$ 結合まわりの回転異性体として垂直型、平面型、ゴーシュ型に固定し(図1(b)参照)それぞれの型において $C-O$ 結合の回転角(α_2)を変化させて計算を行なった。図2(a)基底電子状態(b)カチオン基底電子状態のポテンシャル曲線を示す。

結果および考察 この分子の最低励起電子状態 S_1 の情報を得るために多光子共鳴イオン化(*MPI*)スペクトルを測定した。またイオン生成曲線を測定したところ、イオン電流がなだらかに増加している曲線が得られた。さらに半経験的分子軌道計算により、ベンジルアルコールの基底電子状態およびカチオン基底電子状態の安定構造を求めた。その結果、基底電子状態では、 $C-C$ 結合の回転角は垂直型($\alpha_1 = 90^\circ$)、 $C-O$ 結合の回転角は $\alpha_2 \approx 90^\circ$ で安定構造をもつ。カチオン基底電子状態では、 $C-C$ 結合の回転角は平面型($\alpha_1 = 0^\circ$)、 $C-O$ 結合の回転角は $\alpha_2 \approx 180^\circ$ で安定構造をもつという結果を得た。

この計算結果から基底電子状態、カチオン基底電子状態でポテンシャル曲線が大きく異なっているという結果が得られ、上記のなだらかなイオン生成曲線を与えることが説明できる。

図は 平成7年度修士論文研究発表要旨集参照

keywords

ポテンシャル曲線、MPI、寿命測定、高リユードベリ状態