

|                     |                                                                                 |
|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Title</b>        | 高分解能レーザー光電子分光によるピリミジン分子錯体の研究                                                    |
| <b>Author(s)</b>    | 尾宮, 健司                                                                          |
| <b>Citation</b>     |                                                                                 |
| <b>Issue Date</b>   | 1996-03                                                                         |
| <b>Type</b>         | Thesis or Dissertation                                                          |
| <b>Text version</b> | none                                                                            |
| <b>URL</b>          | <a href="http://hdl.handle.net/10119/2311">http://hdl.handle.net/10119/2311</a> |
| <b>Rights</b>       |                                                                                 |
| <b>Description</b>  | 材料科学研究科, 修士                                                                     |

# 高分解能レーザー光電子分光による ピリミジン分子錯体の研究

尾宮 健司 (木村研究室)

【はじめに】 ピリミジンは環内に2つの窒素原子を含み等価な2つの非結合性軌道(n 軌道)をもっている。第一イオン化はその電子が抜けるものと考えられる。そのイオン化状態については興味をもたれる。本研究ではピリミジン、4-メチルピリミジンおよびそれらの Ar および N<sub>2</sub>とのファンデルワールス (vdW) 錯体カチオンの ZEKE (zero kinetic energy) 光電子分光法を用いて研究した。vdW 錯体は孤立分子と凝縮相の中間の相と考えることができ、双方の状態に対して有用な情報を与えるものである。ZEKE 光電子スペクトルに基づいて、断熱イオン化ポテンシャルの変化、カチオンの振動構造、分子間振動などについて考察した。

【実験】 中間共鳴励起状態(S<sub>1</sub>)を経由する2波長2光子(1 + 1') ZEKE 光電子スペクトルを測定した。S<sub>1</sub>状態の振動準位を選ぶことで、分子種の選別を行った。超音速自由ジェット中、冷却分子に励起用およびイオン化用レーザー光を照射し、パルス電場イオン化法により ZEKE 光電子のみを選択的に検出しレーザー波数の関数として ZEKE 光電子スペクトルを得た。

【結果と考察】 ピリミジンの ZEKE 光電子スペクトルを図1に示す。横軸はゼロ点エネルギー準位を基準にしたイオン内部エネルギー、縦軸は ZEKE 光電子強度である。(a) は S<sub>1</sub> 状態の 0<sup>0</sup>、(b) は 6a<sup>1</sup>、(c) は 6b<sup>2</sup> という振動準位を中間共鳴状態として得られたものである。各スペクトル中の最も大きなピークは、経由した振動準位のカチオンにおける振動数を示している。各々のスペクトルを比較することによって振動の帰属を行った。図2はピリミジン-Ar, -Ar<sub>2</sub> vdW 錯体の ZEKE 光電子スペクトルである。これより、錯体形成に伴う断熱イオン化ポテンシャルの低下が示された。Ar との vdW 錯体のスペクトルにはゼロ点準位のすぐ後に低振動数のピークがいくつかみられる。これらは S<sub>1</sub> 状態ではみられなかったピークであり、何らかの構造変化が生じたものと考えられる。分子間運動の解析より、これらはピリミジン分子と Ar との間の伸縮、変角振動によるものであって、Franck-Condon 解析の結果から結合距離の変化や結合角度に関する知見が得られた。

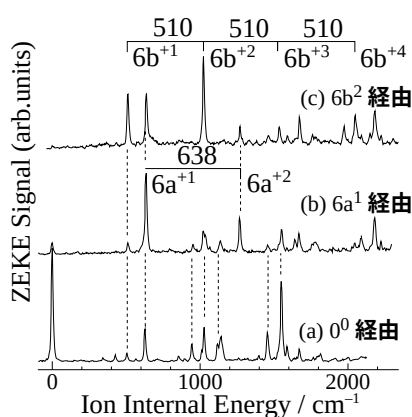


図1. ピリミジンの ZEKE 光電子スペクトル

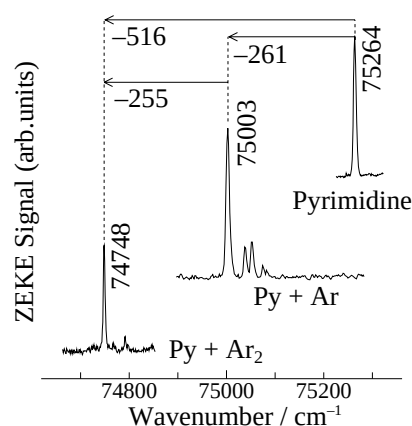


図2. ピリミジン-Ar, -Ar<sub>2</sub> vdW 錯体の ZEKE 光電子スペクトル

keywords

ピリミジン, ZEKE 光電子分光法, vdW 錯体, カチオン, 超音速ジェット