

Title	高分解能レーザー光電子分光法によるn-プロピルベンゼン-アルゴン錯体の研究
Author(s)	小嶋, 俊之
Citation	
Issue Date	1997-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	http://hdl.handle.net/10119/2324
Rights	
Description	Supervisor:木村 克美, 材料科学研究科, 修士

高分解能レーザー光電子分光法による n-プロピルベンゼン-アルゴン錯体の研究

小嶋俊之 (木村研究室)

[序論]

本研究室では、これまで種々のベンゼン誘導体と希ガス原子間に形成されるファンデルワールス (vdW) 分子錯体を、2 波長ゼロ運動エネルギー (Zero Kinetic Energy: ZEKE) 光電子分光法により研究してきた。今回、置換基の立体効果を調べるため、n-プロピルベンゼン (PB) とアルゴンとの間に形成される vdW 錯体の ZEKE 光電子スペクトルの測定を試みた。

[実験]

励起用・イオン化用光源として、二台の色素レーザー (Nd:YAG レーザー励起) から発生した光をさらに倍波としたもの (ν_1, ν_2) を用いた。キャリアガスはアルゴン (3.5 atm) を用い、サンプルを超音速ジェットとして真空チェンバー内に導入した。vdW 錯体に励起光 (ν_1) を照射して S_1 状態に励起し、さらにイオン化光 (ν_2) を照射した。この時発生した ZEKE 光電子を選択的に捕捉し、ZEKE 光電子スペクトルを測定した。また、非経験的分子軌道法計算により分子構造の最適化および振動力場計算を行った。

[結果と考察]

Fig.1 に S_1 オリジン経由のトランス型とそのアルゴン vdW 錯体の ZEKE 光電子スペクトルを示す。なお、ゴーシュ型の錯体の信号は今回の測定では検出できなかった。フリーなトランス PB では断熱イオン化ポテンシャル (I_a) は $I_a = 70267 \pm 6 \text{ cm}^{-1}$ であった。この値は高橋ら¹⁾の結果とよく一致している。アルゴンとの vdW 錯体では $I_a = 70155 \pm 6 \text{ cm}^{-1}$ となり、錯体を形成することにより 112 cm^{-1} 安定化していることが初めて明らかになった。この値は、ベンゼン-アルゴン錯体の 172 cm^{-1} と比べて小さい。スペクトルの特徴として、(1) ファンデルワールス振動のプロプレッションは、他のベンゼン置換体のアルゴン vdW 錯体とは異なり、観測されない、(2) プロピル基由来の低振動モードは錯体形成によりほとんど変化しないことが明らかになった。また、非経験的分子軌道法計算により、中性基底状態については Fig.2 に示すような 2 つの構造を仮定し、分子構造の最適化をしたところ、置換基に近い側の方 (図中の (b)) がエネルギー的に約 90 cm^{-1} 安定であるという結果を得た。したがって、今回観測された n-プロピルベンゼン-アルゴン vdW 錯体は、アルゴンが置換基側についた構造であることが示唆された。

1) M.Takahashi and K.Kimura, J. Chem. Phys., 97, 2920 (1992).

keywords

ZEKE 光電子分光、回転異性体、ファンデルワールス錯体

著者に無断でのコピー頒布はお控え下さい。