

Title	レーザー光電子分光法によるナフタレン置換体カチオンの振動構造の研究
Author(s)	黒瀬, 敬広
Citation	
Issue Date	1998-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	http://hdl.handle.net/10119/2458
Rights	
Description	木村克美教授, 材料科学研究科, 修士

レーザー光電子分光法による ナフタレン置換体カチオンの振動構造の研究

黒瀬 敬広 (木村研究室)

【はじめに】

最近、高分解能ゼロ運動エネルギー (ZEKE) 光電子分光法によって、断熱イオン化ポテンシャルや分子カチオンの振動準位 (低振動モードも含む) を精密に測定できるようになった。今回、水酸基を有するナフタレン置換体として代表的な 1-ナフトールに注目した。1-ナフトールは水、アルコールなどと水素結合錯体を容易に形成するため、物理化学的に興味もたれ、これまで広く研究が行われてきている。しかし、1-ナフトールについては ZEKE 光電子スペクトルからの断熱イオン化ポテンシャルは報告されているものの、振動スペクトルについては解析されていない。本研究では、二光子共鳴励起を活用した励起状態経由のスペクトルから 1-ナフトールカチオンの低振動モードの帰属を行った。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も合わせて行った。さらに、超高リユードベリ状態の寿命測定も行った。

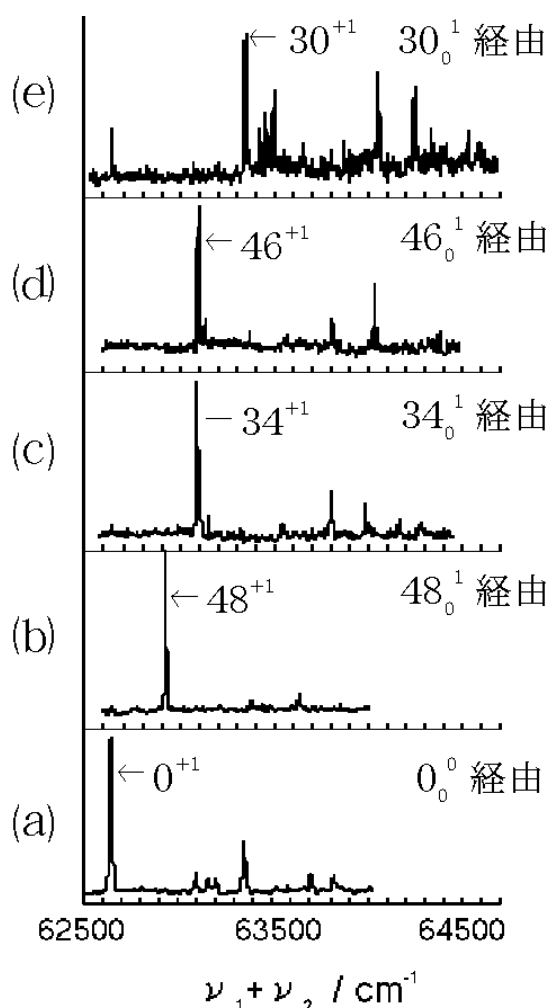


図 1: 1-ナフトールの (1+1') 共鳴イオン化 ZEKE 光電子スペクトル

【実験】

1-ナフトールを 100 °C に加熱した後、キャリアガス (Ar) とともに高真空中に超音速ジェットとして導入した。これに Nd:YAG レーザーを光源として 2 台の波長可変色素レーザーを励起し、非線形結晶により倍波となった紫外光を励起光 (ν_1) およびイオン化光 (ν_2) とし照射した。レーザー光が電子遷移に共鳴したとき発生する ZEKE 光電子を選択的に捕捉しながら、 ν_2 を波長掃引することによって、ZEKE 光電子スペクトルを測定した。

【結果と考察】

図 1 に最低励起一重項状態 S_1 の (a) 0_0^0 準位、(b) 48_0^1 (CC nonplanar torsional mode) (274cm^{-1})、(c) 34_0^1 (CCC angle deformation) (410cm^{-1})、(d) 46_0^1 (CC nonplanar torsional mode) (452cm^{-1})、(e) 30_0^1 (CC bond stretching) (665cm^{-1}) を経由した ZEKE 光電子スペクトルを示す。スペクトル (a) から、1-ナフトールの断熱イオン化ポテンシャルを 62640cm^{-1} と決定した。また、 $\Delta v=0$ の選択則から、最も強いピークはそれぞれ経由した振動モードであると考えられる。このことから (b) 48^{+1} (287cm^{-1})、(c) 34^{+1} (451cm^{-1})、(d) 46^{+1} (460cm^{-1})、(e) 30^{+1} (707cm^{-1}) であることが分かった。これらの振動モードは今回の測定で、はじめて帰属できた。さらに超高リユードベリ状態の寿命測定から、半減期がおよそ $7 \sim 9\mu\text{s}$ であることが分かった。

keywords

ZEKE 光電子、1-ナフトール、振動構造、共鳴励起