

## 1P32

$H^+ \cdot (CH_3COOH)_n$  および  $H^+ \cdot (CH_3COOH)_n \cdot H_2O$  ( $n=1-5$ ) の赤外  
光解離分光

(分子研)

○井口佳哉、小杉健太郎、西信之

Infrared photodissociation spectroscopy of  
 $H^+ \cdot (CH_3COOH)_n$  and  $H^+ \cdot (CH_3COOH)_n \cdot H_2O$  ( $n=1-5$ )

IMS

OY. Inokuchi, K. Kosugi, and N. Nishi

【はじめに】我々は昨年、酢酸・ベンゼンダイマーイオンの電子、幾何構造を、光解離分光法および ab initio 分子軌道法によって明らかとした [1]。この系では、カルボニル基の非結合性電子軌道がベンゼンサイトへと非局在することにより大きな安定化エネルギーを生じさせている。そこで我々は、引き続きカルボニル基の存在によるクラスター形成の特異性を検証することを目的として本研究を行った。特に酢酸・水混合クラスターイオンは、酢酸水溶液における酸解離反応の生成物としても重要な系である。これ以降、酢酸分子を A、水分子を W で表す。

【実験】実験は、四重極イオンガイドを持つタンデム型質量分析計と、光パラメトリック発振赤外レーザを用いて行った。詳細は既報論文を参照されたい [1]。

【結果・考察】図 1 に酢酸・水混合クラスターイオンの質量スペクトルを示す。ここで、 $n=1-4$  では  $H^+ \cdot A_n \cdot W$  に対して  $H^+ \cdot A_n$  のイオン強度がはるかに大きいのが、 $n=5$  では  $H^+ \cdot A_5 \cdot W$  が  $H^+ \cdot A_5$  を上回っていることがわかる。この  $H^+ \cdot A_5 \cdot W$  の特異な安定性から、 $H^+ \cdot A_n \cdot W$  ( $n=1-4$ ) とは異なる、 $n=5$  特有の安定構造が存在することは容易に予想される。図 2 に  $H^+ \cdot A_n \cdot W$  の赤外スペクトルを示す。 $n=1-4$  では、 $3600\text{ cm}^{-1}$  付近に酢酸のフリーの OH 伸縮振動と帰属されるバンドが存在している。それに対し  $n=5$  では、酢酸のフリーの OH は観測されず、すべての酢酸分子の OH 基が分子間結合に関与している。これより、 $n=5$  では、以前の研究で示唆された様に [2]、 $H_3O^+$  を 5 つの酢酸分子が互いに水素結合しながら取り囲んだ、リング構造をとっていると考えられる。

[1] K. Kosugi, Y. Inokuchi, and N. Nishi, *J. Chem. Phys.* **114**, 4805 (2001).

[2] M. Tsuchiya et al., *J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.* **46**, 483 (1998).

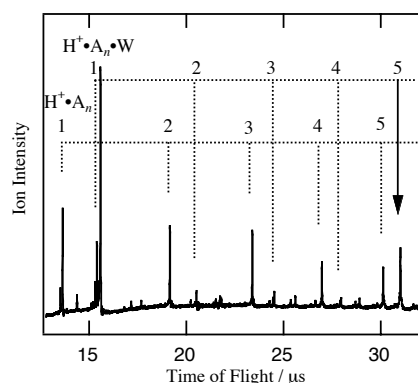
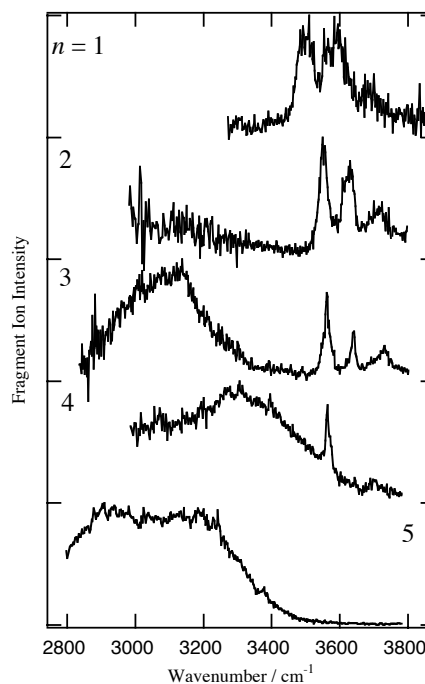


図1 質量スペクトル

図2  $H^+ \cdot A_n \cdot W$  の赤外光解離スペクトル