

ベンゼン-トルエン混合クラスターイオンの Local Excitation Band の観測  
 -混合クラスターイオンの電荷分布の検証-

(九大理)

○井口 佳哉・大橋 和彦・西 信之

【はじめに】我々はこれまでに観測したベンゼン (B) -トルエン (T) 混合ダイマーカチオン ( $BT^+$ ) の近赤外領域の光解離スペクトルから、 $BT^+$ 内ではイオン化ポテンシャルの高い ( $\Delta IP = 0.42 \text{ eV}$ ) ベンゼン側にも正電荷が分布していることを明らかにした。この電荷分布の情報はモノマーカチオンユニットの局所励起に対応する吸収帯 (Local Excitation band、LE) にも明確に現れることが予想される。本研究では $BT^+$ 、 $B_2^+$ 、 $T_2^+$ の可視領域 (380 - 480 nm) の詳細な光解離スペクトルを観測し、それらを比較することにより $BT^+$ の電子状態について考察する。

【実験】以下 $BT^+$ について述べる。アルゴンとベンゼン、トルエンの混合ガスをパルスノズルを通して真空中に導入し、レーザー誘起プラズマ法によりイオン化した。生成した $BT^+$ を四重極質量分析計で選別しイオンベンダーで $90^\circ$ 方向転換後オクタポールイオントラップで捕捉した。オクタポールと同軸状にレーザー光を導入して $BT^+$ を光励起し、それに伴い解離生成した $T^+$ を四重極質量分析計で選別しセラトロンで検出した。解離光の波長に対して $T^+$ の収量をプロットすることで $BT^+$ の光解離スペクトルを得た。

【結果と考察】図1に $T_2^+$ 、 $BT^+$ 、 $B_2^+$ の光解離スペクトルを示す。これらの吸収帯はすべてLE ( $\pi\pi$ ) と帰属されている。 $T_2^+$ についてはダイマー形成に伴い440 nm に極大をもつLE ( $\pi\pi$ ) が観測され、 $B_2^+$ は430 nm 付近に極大を示した ( $B_2^+$ の443 nm の極大については振動構造、異性体両面の可能性で検討している)。 $BT^+$ については425 nm に極大をもつに加え、440 nm 付近にもう一成分の吸収帯の存在が明らかになった。もし、 $BT^+$ において正電荷がトルエン側に局在しているならばその光解離スペクトルは $T_2^+$ に類似したものになるはずである。しかし実際の $BT^+$ の光解離スペクトルは $T_2^+$ とは全く異なり、これより正電荷はトルエン側だけでなくベンゼン側にも分布していることが実証された。 $T_2^+$ 、 $B_2^+$ の光解離スペクトルとの比較から、 $BT^+$ の光解離スペクトル中の425 nm の極大はベンゼンカチオンユニットの局所励起に、440 nm はトルエンカチオンユニットの局所励起に由来する吸収帯と予想されるがその詳細については現在検討中である。

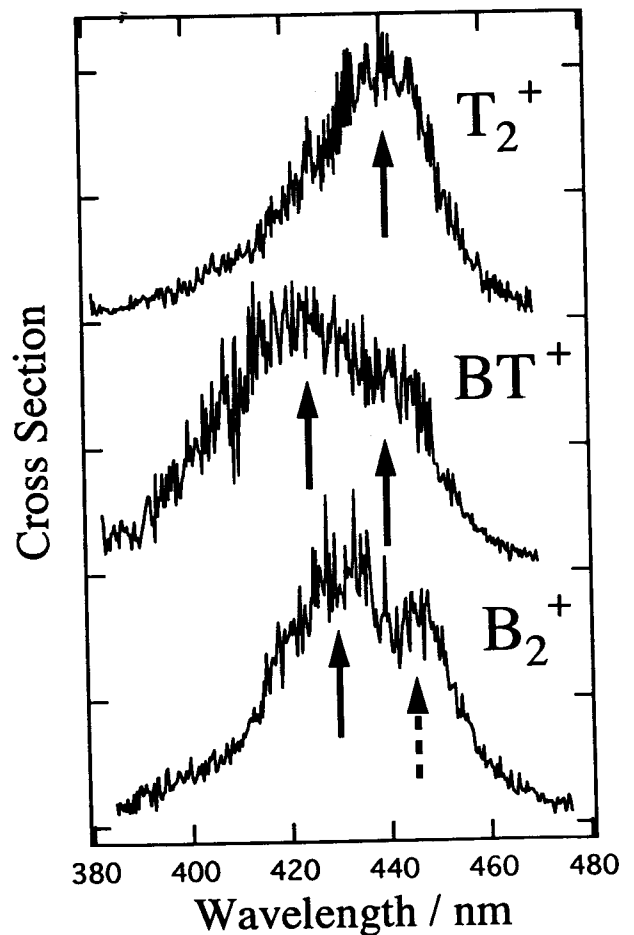


図1. 光解離スペクトル