

ベンゼン 3 量体イオンの紫外～赤外スペクトル
— クラスタ内電荷の静的・動的挙動 —

(分子研・九大理) ○井口 佳哉・大橋 和彦・西 信之

【序】ベンゼン 3 量体イオンについてはこれまでに近赤外～可視波長領域の光解離スペクトルが観測され、このスペクトルからベンゼン 3 量体イオンはダイマージオンコアを持つ 3 重平行構造であると帰属されている。本研究ではこの波長領域を紫外・赤外領域へと拡張して測定を行った。これらのスペクトルにより、クラスタ内正電荷の静的・動的挙動の詳細が明らかとなった。

【実験】電子衝撃法によりイオン化後、四重極マスフィルタにより選別したベンゼン 3 量体イオンをオクタポールイオンガイドへと導いた。このオクタポールと同軸状にレーザ光を導入し 3 量体イオンを励起した。励起に伴い生成するフラグメントイオンを第二の四重極マスフィルタによって選別し二次電子増倍管により検出した。レーザ光の波長に対してフラグメントイオンの収量をプロットすることにより 3 量体イオンの光解離スペクトルを得た。なお、赤外スペクトルについては $(C_6H_6)_3^+$ に加え、 $(C_6H_6)_2(C_6D_6)^+$ 、 $(C_6H_6)(C_6D_6)_2^+$ 、 $(C_6D_6)_3^+$ についても測定を行った。

【結果と考察】図 1 に $(C_6H_6)_3^+$ の赤外スペクトルを示す。2986、3047 cm^{-1} に吸収極大を観測した。このうち 3047 cm^{-1} の吸収はダイマージオンコア外にある、第 3 のベンゼンの C-H 伸縮振動と帰属した。また、2986 cm^{-1} の吸収はダイマージオンコアを構成しているベンゼンの C-H 伸縮振動と帰属した。図 2 には $(C_6H_6)(C_6D_6)_2^+$ の赤外スペクトルを示した。図中の化学式は検出したフラグメントイオンを示している。この領域には重置換ベンゼン由来の吸収はない。3 重平行構造を持つ 3 量体イオンがこのエネルギー領域で振動前期解離をおこす際、両端の 2 個のベンゼンがフラグメントダイマージオンを形成することはないと仮定する。図 2 の領域の吸収はダイマージオンコアを形成する C_6H_6 の C-H 伸縮振動によるものなので、 $(C_6D_6)_2^+$ 検出で信号が観測されたことは、振動励起状態において $(C_6H_6)(C_6D_6)^+$ から $(C_6D_6)_2^+$ へのコアスイッチング (電荷ホッピング) が起こっていることを意味する。また、ダイマージオンコア外にある第 3 のベンゼンの電子状態の情報を得ることを目的とした紫外スペクトルについても報告する予定である。

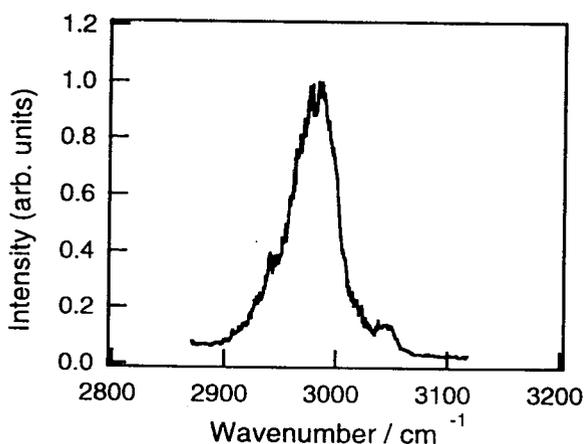


図 1 $(C_6H_6)_3^+$ の赤外スペクトル

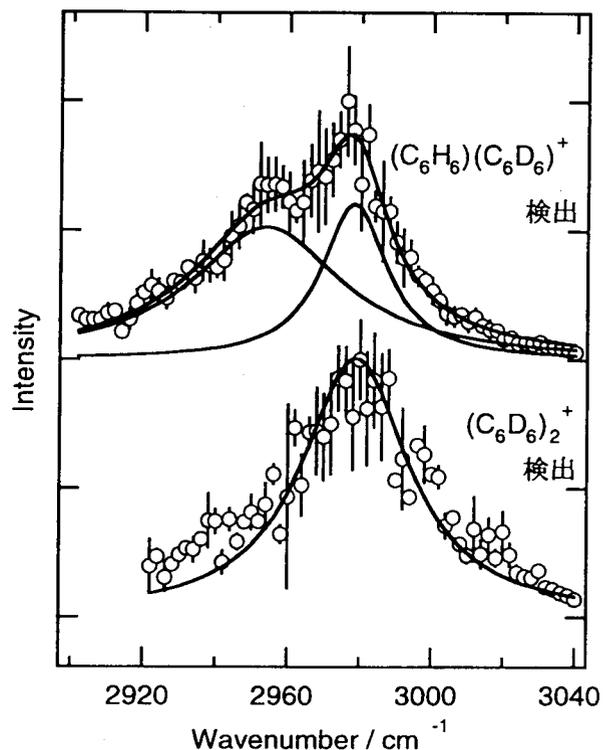


図 2 $(C_6H_6)(C_6D_6)_2^+$ の赤外スペクトル