

4P126

プロジェクション法によるCF₄分子のF 1s光電子角度分布の研究

(東北大・多元研¹, 産総研・計測標準², トリエステ大³)

○坂井 健太郎¹, 寺西 孝説¹, Liu XiaoJing¹, 福澤 宏宣¹, 齋藤 則生²,
森下 雄一郎², Decleva Piero³, Stener Mauro³, Prümper Georg¹, 上田 潔¹

分子の光イオン化ダイナミクスの詳細を理解するために、分子座標系における光電子角度分布 (Molecular-Frame Photoelectron Angular Distribution, MFPAD) の測定は有効な研究手段である。本研究では CF₄ 分子の F 1s 光イオン化後に放出される光電子と CF₃⁺ - F⁺ イオン対を同時計測し、我々が最近開発した“プロジェクション法”により解析した。MFPAD を測定する我々の装置は、位置敏感検出器を備えた2台の飛行時間型運動量分光計により、全立体角に放出される電子とイオンを検出するものである^[1,2]。分子軸の向きは axial recoil 近似により決定される。ところが、これまでの解析法では、入射光の電気ベクトルと分子軸の張る平面上に電子が放出されるイベントのみを選択していたため、大部分のイベントを無視していた。“プロジェクション法”では全イベントを用いて解析する^[3]。したがって、これまでよりも統計の良いデータを短時間で取得することが可能となった。

実験は SPring-8 の BL27SU で行った^[1,2]。F⁺ と CF₃⁺ の同時計測により分子軸を決定し、さらにこれらと光電子を同時計測することにより分子座標系における光電子放出角度を決定した。

図1に入射光子エネルギー 705 eV, 725 eV, および 775 eV で測定した F 1s 光電子放出について、プロジェクション法により解析した結果と、理論計算による結果を示す。強度は入射光の電気ベクトルと分子軸のなす角が 0° の MFPAD によって、全面積が等しくなるように規格化してある。localized core model とは、内殻空孔がイオン化フラグメントとして放出される F⁺ に局在化しているとした計算結果であり、delocalized core model では内殻空孔は4つの F 原子に分布させたものである。705 eV と 775 eV では localized core model の方が実験から得られる MFPAD をよく再現しているが、725 eV では delocalized core model の方が実験データに一致しているようである。詳細については現在考察中である。

参考文献

- [1] Y. Morishita *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **144-147**, 255 (2005).
- [2] Y. Morishita *et al.*, Radiat. Phys. Chem. **75**, 1977 (2006).
- [3] R. R. Lucchese *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **155**, 95 (2007).
- [4] T. D. Thomas, J. Am. Chem. Soc. **92**, 4184 (1970).

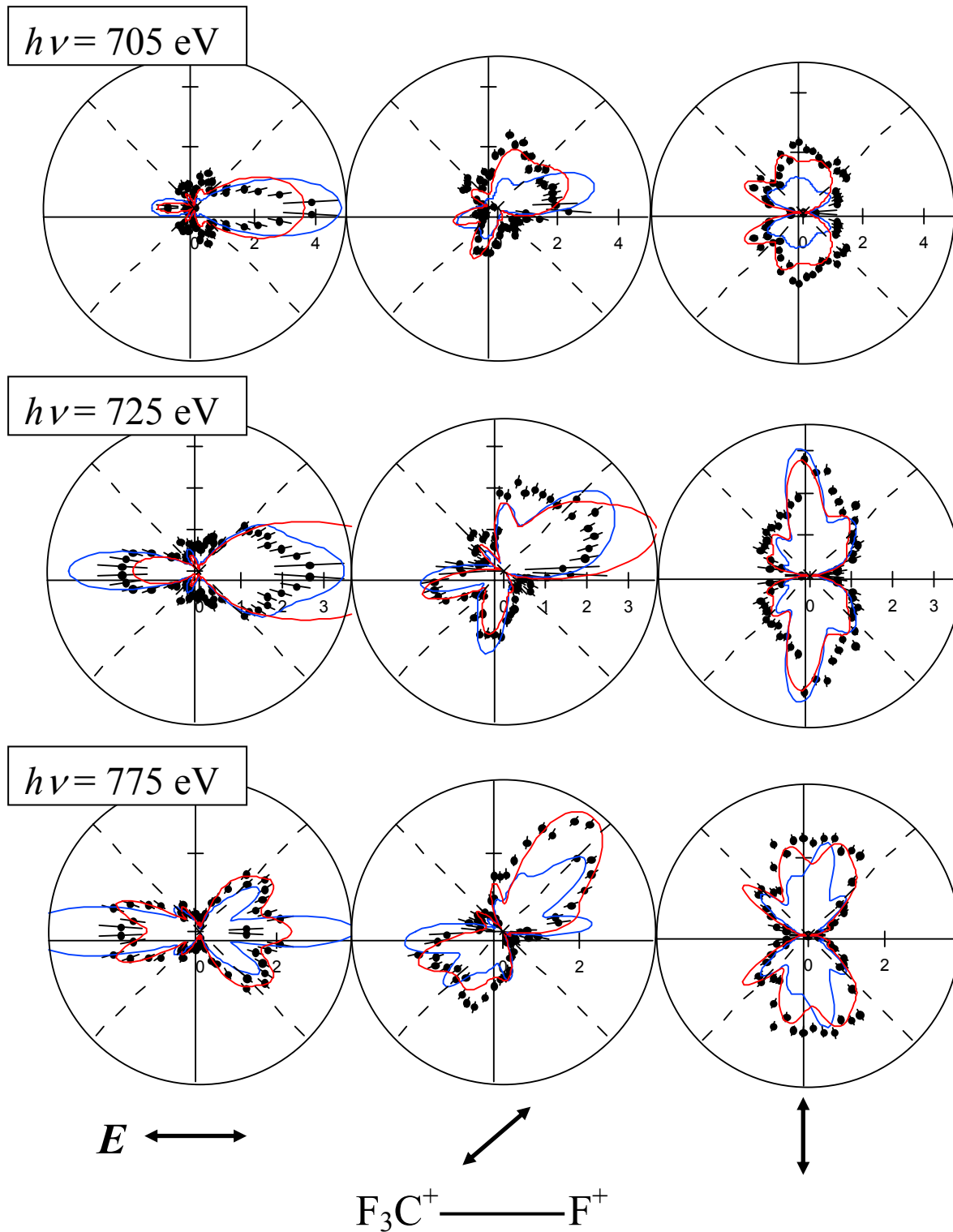


図 1. CF_4 分子の F 1s 光電子放出の MFPAD。黒丸は実験データからプロジェクション法によって得られた MFPAD であり、赤線は localized core model、青線は delocalized core model により得られた理論計算の結果である。角度は F^+ の反跳方向を 0° 、 CF_3^+ の反跳方向を 180° と定義している。入射光子エネルギーは 705 eV, 725 eV, 775 eV であり、入射光と分子軸のなす角が $0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$ のものを示してある。 CF_4 分子の F 1s イオン化ポテンシャルは 695.0 eV^[4]。なお、光電子放出方向は、入射光の電気ベクトルと分子軸の張る平面上である。