

## 4P051 コインシデンス運動量画像法を用いたメチルアセチレンの超高速水素ダイナミクス

(東大院理) ○渡部 愛理、Xu Huailiang、沖野 友哉、山内 薫

### 【序】

強光子場 ( $10^{13} \sim 10^{15} \text{ W/cm}^2$ ) にメタノールなどの炭化水素分子をさらすと分子内水素マイグレーションが起こること[1]、および水素分子イオン ( $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_3^+$ ) が生成すること[2]が明らかとなった。さらに最近の我々の研究から、メチル基を有さないアレン ( $\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$ ) 分子から  $\text{H}_3^+$  が生成することが分かっている。本研究ではコインシデンス運動量画像法を用いて、アレン ( $\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$ ) の構造異性体であるメチルアセチレン ( $\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ ) について強光子場中における水素分子イオン生成および分子内水素マイグレーション過程を調べた。

### 【実験】

再生増幅フェムト秒レーザー (790 nm, 40 fs, 5 kHz, 40  $\mu\text{J}$  / pulse, 直線偏光) の出力を、超高真空チャンバー ( $3 \times 10^{-10} \text{ Torr}$ ) 内でメチルアセチレンに集光照射した。この時、強光子場中 ( $2.2 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ ) で生成したフラグメントイオンを2次元位置敏感型検出器で到達時間と検出器上の位置を記録し、各フラグメントイオンの運動量を決定した。

### 【結果と考察】

図1にメチルアセチレンの飛行時間型質量スペクトルを示す。

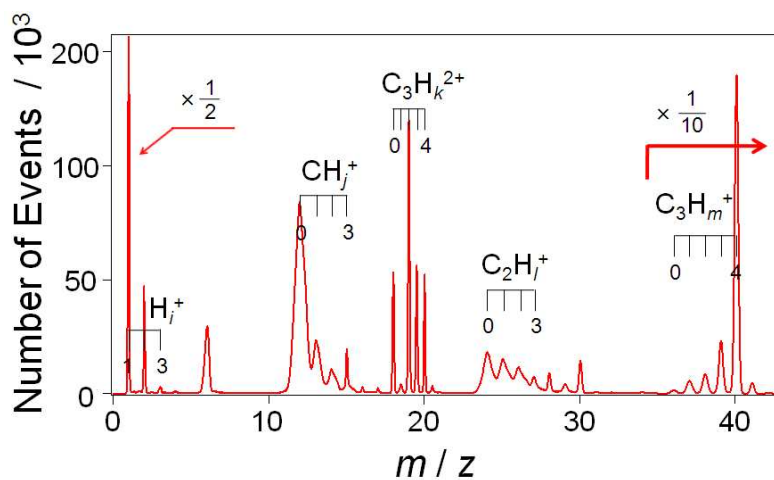


図1: メチルアセチレンの飛行時間型質量スペクトル

#### (i) C-H 結合の解離を伴うクーロン爆発過程

水素原子イオンの生成を伴う解離過程



が観測された他、水素分子イオン ( $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_3^+$ ) の生成を伴う解離過程



が観測された。図2(a), (b) に  $\text{H}_2^+$  および  $\text{H}_3^+$  のコインシデンス運動量画像を示す。 $\text{H}_2^+$  は  $[\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}]^{2+}$  のメチル基、または、水素マイグレーション後生成した2価の前駆体イオン

$[\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2]^{2+}$ のメチレン基から、 $\text{H}_3^+$ は  $[\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}]^{2+}$ のメチル基より生成していると考えられる。 $\text{H}_3^+$ に対する $\text{H}_2^+$ の生成比  $\gamma = [\text{H}_2^+]/[\text{H}_3^+]$  はメチルアセチレンでは $\gamma = 2.0$ であった。このことは、クーロン爆発前に水素マイグレーションが起こっていること、そして、2価の前駆体イオン $[\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2]^{2+}$ が生成した後に $\text{H}_2^+$ が生成する過程の方が、 $[\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}]^{2+}$ から $\text{H}_3^+$ を生成する過程よりも起こりやすいということを示している。

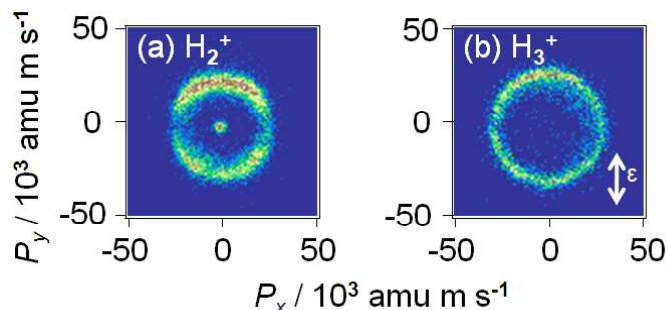
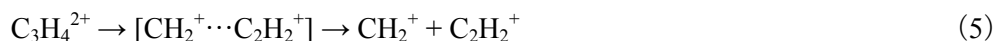


図2：C-H結合解離を伴う過程によって生成するフラグメントイオンのコインシデンス運動量画像。 [(a)  $\text{H}_2^+$ , (b)  $\text{H}_3^+$ ]

(ii) C-C結合の解離を伴うクーロン爆発過程

C-C結合の解離を伴うクーロン爆発過程として、



が観測された。

過程(5)はメチル基の水素原子が他の炭素原子にマイグレーション後にC-C結合が解離する2体クーロン爆発過程である。図3(a), (b)にそれぞれ $\text{CH}_2^+$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2^+$ のコインシデンス運動量画像を示す。解離過程(4), (5), (6)の比率は0.14 : 1 : 0.21であった。これは、水素マイグレーションを伴う解離過程が主たるものであり、マイグレーションをしてアレン型の構造を取りやすいことを示している。

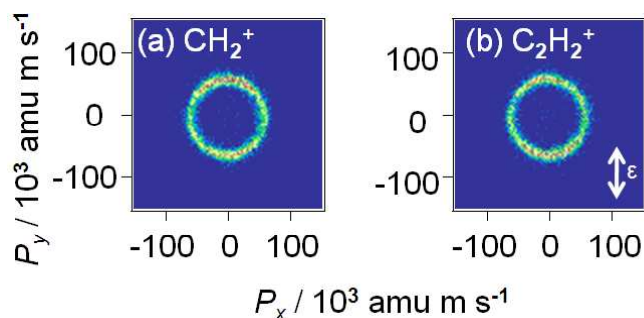


図3：C-C結合解離を伴う過程によって生成するフラグメントイオンのコインシデンス運動量画像。 [(a)  $\text{CH}_2^+$ , (b)  $\text{C}_2\text{H}_2^+$ ]

【参考文献】

- [1] T. Okino, Y. Furukawa, P. Liu, T. Ichikawa, R. Itakura, K. Hoshina, K. Yamanouchi, H. Nakano, Chem. Phys. Lett. 419 (2006) 223.  
 [2] Y. Furukawa, K. Hoshina, K. Yamanouchi, H. Nakano, Chem. Phys. Lett. 414 (2005) 117.