

## 2P020

イオン同時計測法による内殻励起パーフルオロシクロブタンの解離ダイナミクス  
 (広島大学院理<sup>1</sup>, JASRI/SPRing-8<sup>2</sup>, 高工機構<sup>3</sup>, 愛媛大理<sup>4</sup>) ○末光 篤<sup>1</sup>, 岡田 和正<sup>1</sup>, 寺  
 島 妙美<sup>1</sup>, 為則 雄祐<sup>2</sup>, 鈴木 功<sup>3</sup>, 田林 清彦<sup>1</sup>, 長岡 伸一<sup>4</sup>)

【緒言】我々は放射光を用いた気体分子の内殻励起とその後の解離ダイナミクスに興味をも  
 って研究している。内殻電子は原子の近傍に存在し、化学結合には直接関与しないが、内殻  
 励起後に起こる Auger 過程によって価電子を失い、最終的に断片イオンへと解離する。これ  
 まで我々は、パーフルオロシクロブタンの炭素・フッ素内殻領域における解離イオン対の飛  
 行時間型質量計測を行った。そこで得られたイオン対の相関マップの島の傾きから、 $CF_2^+$ と  
 同時に生じるイオンを生成する解離過程において解離機構を考察した[1,2]。

本研究では実際の解離時のイオン対の運動エネルギー放出などの物理量を得る目的で、  
 $CF_2^+$ と相関する解離イオン対の相関マップを再現するシミュレーションを行った。

【解析の原理】過去の文献[3]を参考に、任意の解離過程での相関マップを再現するシミュレ  
 ーションを行うプログラムを作成した。二価のイオン生成後の多段階の解離において図 1 に  
 ある  $p$ ,  $q$ ,  $\chi$ ,  $\gamma$ ,  $\theta$  を決めることで相関マップを再現することができる。ここで、 $p$ ,  $q$   
 とはそれぞれ一価のイオンが生成する場合の一段階目と二段階目の運動量,  $\chi$  は分子の遷移  
 モーメントと解離イオンの飛び出る方向のなす角,  $\gamma$  は二つのイオンの運動量ベクトルのな  
 す角,  $\theta$  は遷移モーメントとイオンの飛び出る方向からなる平面からの法線と検出器方向へ  
 の線がなす角である。解離の過程としては、二体解離, 三体解離, 四体解離などがある。ま  
 た、三体解離には遅延型電荷分離・二次的崩壊・競争的解離という過程があり、四体解離に  
 おいても同様にいくつかの過程が存在する。図 1 右では、例として、三体解離の二次的崩壊  
 ( $ABC^{2+} \rightarrow AB^+ + C^+$ ,  $AB^+ \rightarrow A + B^+$ )におけるそれぞれのパラメータを示したものである。  
 シミュレーションで再現されたイオン対の島と、実験で得られた島の広がり一致するよう  
 なパラメータを見つける。

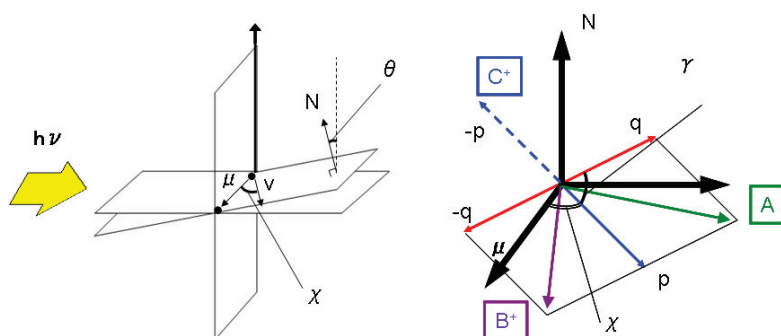


図1. シミュレーションに用いるパラメータ  
 ( $p$ ,  $q$ ,  $\chi$ ,  $\gamma$ ,  $\theta$ )

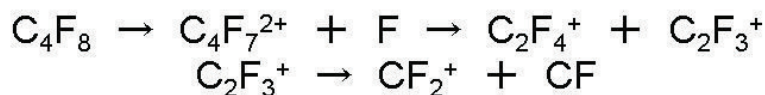


図2. 二次的崩壊を経る解離過程

【結果・考察】例として、実験で得られたパーフルオロシクロブタンの炭素内殻励起後の解離で得られた  $\text{CF}_2^+$  と  $\text{C}_2\text{F}_4^+$  の二次的崩壊の解離過程を図 2 に示す。また、炭素内殻励起後の解離イオン対の相関マップを図 3 に、イオン対  $\text{CF}_2^+$  と  $\text{C}_2\text{F}_4^+$  について実験で得た相関マップを拡大したものと、シミュレーションで再現された相関マップを重ね合わせたものを図 4 に示す。ここで、等高線で示されたものは実験で得られたイオン対の収量の相関マップで、濃淡が収量を示している。丸で示されたものはシミュレーションで再現された時間相関プロットである。このシミュレーションは、1 つの二価のイオンが、2 つの一価のイオンに解離したときの運動エネルギー放出を 19 (eV)、一価のイオンがさらに解離する際の運動エネルギー放出を 3 (eV) とした場合のものである。

図 4 のように、実験結果とシミュレーション結果のよい一致が見られた。現在、さらに異なる解離過程についても同様にシミュレーションを行っており、その結果については当日報告する。

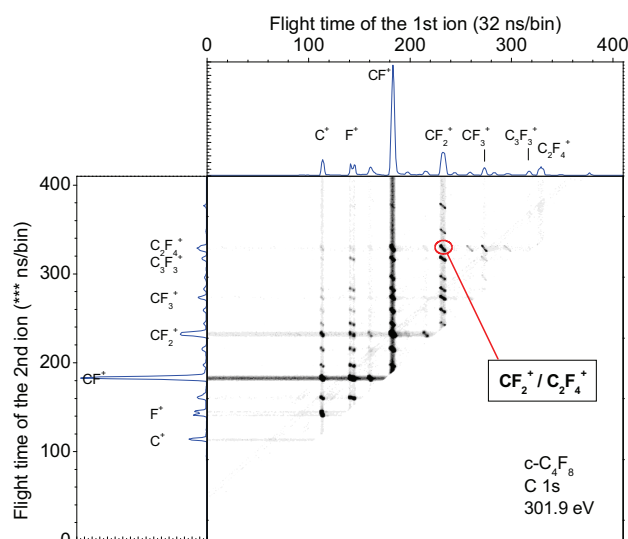


図3. c-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>炭素内殻励起後の解離イオン対相関スペクトル

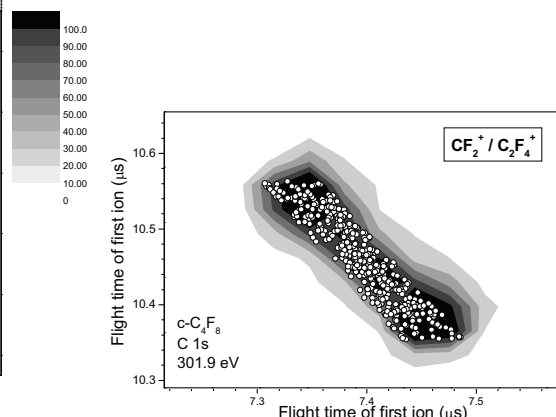


図4. 実験結果とシミュレーション結果の比較

### 【参考文献】

- 1) 寺島妙美, 岡田和正, 池本真理子, 為則雄祐, 清水亜由美, 新田晃子, 鈴木功, 田林清彦, 長岡伸一, 2008年日本化学会西日本大会, 2F-05, 長崎 (2008).
- 2) 岡田和正, 寺島妙美, 池本真理子, 為則雄祐, 鈴木功, 田林清彦, 長岡伸一, 日本化学会第89春季年会, 1E6-47, 船橋 (2009).
- 3) M. Simon, T. Lebrun, R. Martins, G. G. B. de Souza, I. Nenner, M. Lavollee, P. Morin, *J. Phys. Chem.*, **97**, 5228 (1993).