

六極不均一電場を用いた非対称コマ分子の回転状態選別

(阪大院理¹, Perugia 大²) ○蔡 徳七¹, Palazzetti Federico², 奥乃 靖弘¹, Aquilanti Vincenzo², 笠井 俊夫¹

【序】 六極不均一電場を用いることでヨウ化メチル分子のような対称コマ分子や OH ラジカルのようなラジカル分子の単一量子状態の選別が可能であり、これまで多く報告されている。状態選別後に均一電場を用いることで実験室系に対して分子の配向状態が規定でき、反応における分子配向依存性に関する研究も可能である。しかし、三つの慣性モーメントを持つ非対称コマ分子に関する状態選別に関しては、これまで数例の報告にしか過ぎない。Brooks 等は分子線強度の六極電場印加電圧依存性（収束曲線）を測定し分子の双極子モーメントを決定することを試みた。¹その際、Stark エネルギーは対称コマ分子と同じ1次の Stark エネルギーを仮定し。Curtiss 等は実験により得られた CF_2H_2 分子の収束曲線を再現するために Stark エネルギーを4次の多項式で近似し解析した。²今回、我々は非対称コマ分子であるプロピレンオキシド (PO) の収束曲線を求めた。電場と分子の相互作用を表す Stark エネルギーは理論計算から正確に求め、軌跡シミュレーションによる計算結果と比較した。さらに、六極電場法による非対称コマ分子の回転状態選別に関する議論を行った。

【実験】 六極電場を用いた非対象コマ分子の回転状態選別に関する装置図を図2に示す。PO 分子線は蒸気圧 (70 Torr) を真空中に噴出することで発生した。He バッファーガスに20%シードした PO に関しても同様の実験を行った。六極電場により状態選別した後、四重極質量分析計により分子線強度を測定した。六極電場印加電圧を変化させ分子強度の変化を測定した。分子線の速度は回転チョッパーを用いて測定した。PO 分子線の速度及び He シードした場合の分子線速度はそれぞれ、670, 1000 m/s であった。

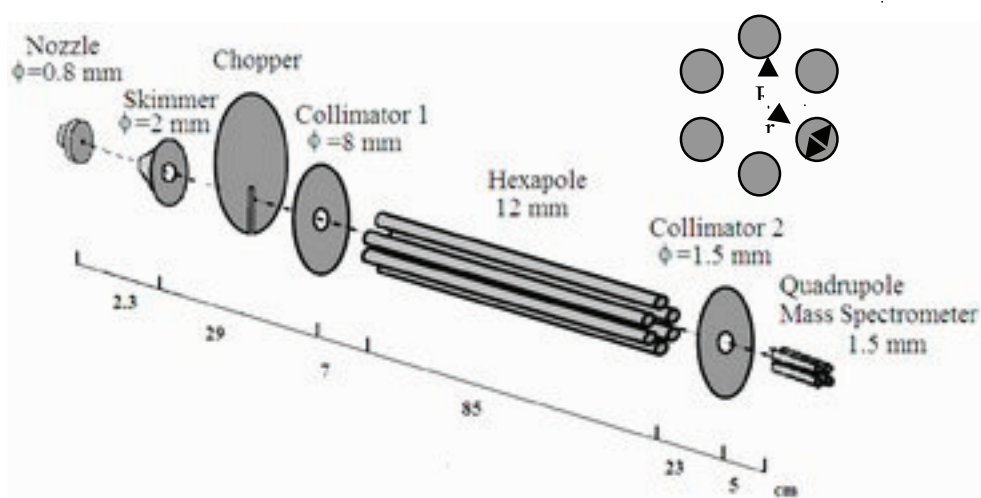


図1. 実験装置図

【結果と考察】 図 2 a)に PO の収束曲線を示す。六極電場印加電圧が 1.5kV から立ち上がり、印加電圧の増大とともに分子線強度が増大していることがわかる。これは Stark 効果により PO 分子が分子線進行方向に収束するためである。図 3 a)に He シードした場合の収束曲線を示す。He シードの場合、収束曲線の立ち上がりが高電圧側にシフトしていることが、これは He シードにより分子線の速度が大きくなったためである。得られた実験結果を再現するために我々は六極電場中での PO 分子の軌跡シミュレーションを行った。非対称コマ分子は電場との相互作用により 2 次の Stark 効果を受ける。その Stark エネルギーは式 (1) のように正確に表すことができる。

$$W_{Stark} = \frac{2E^2}{A+C} \sum_{g=x,y,z} \mu_g^2 [A_{|J\tau\rangle}(k, \alpha) + B_{|J\tau\rangle}(k, \alpha) M^2] \quad \text{式 1}$$

ここで、A, B, C は非対称コマ分子の慣性モーメント、 μ_g は分子が持つそれぞれの軸方向に対する双極子モーメントの成分である。A_{|Jτ>} 及び B_{|Jτ>} は分子の各回転状態における Stark パラメーターである。各回転状態において式 (1) から Stark エネルギーを求め、軌跡シミュレーションを行った。結果を図 2 a) 及び 3 a) の実線で示した。シミュレーションの結果は実験結果とよい一致を示した。シミュレーションの結果から PO 分子線及び He シードの場合の分子線の回転温度は 20 及び 10K であった。また、シミュレーションから各電圧で収束される PO 分子の回転状態を求めた結果を図 2 b) 及び 3 b) に示す。図から、分子の回転状態により収束曲線が大きく変化していることがわかる。これは分子の六極電場印加電圧及び分子線速度を制御することで分子の回転状態が選別できることを示すものである。

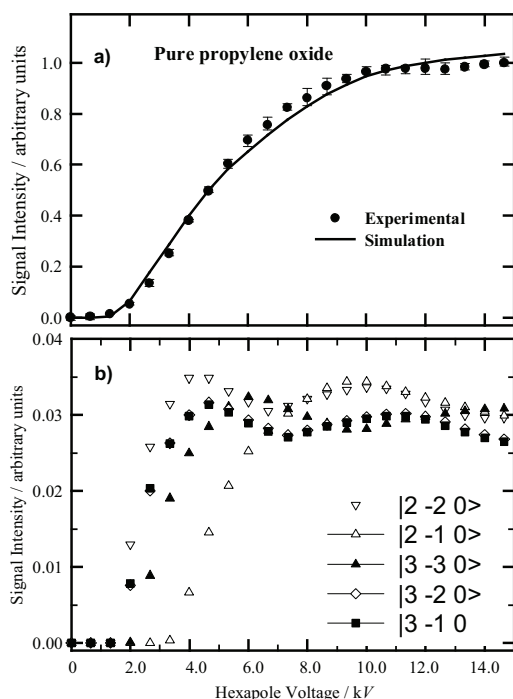


図 2 a) PO 分子線の収束曲線
b) 各回転状態の収束曲線

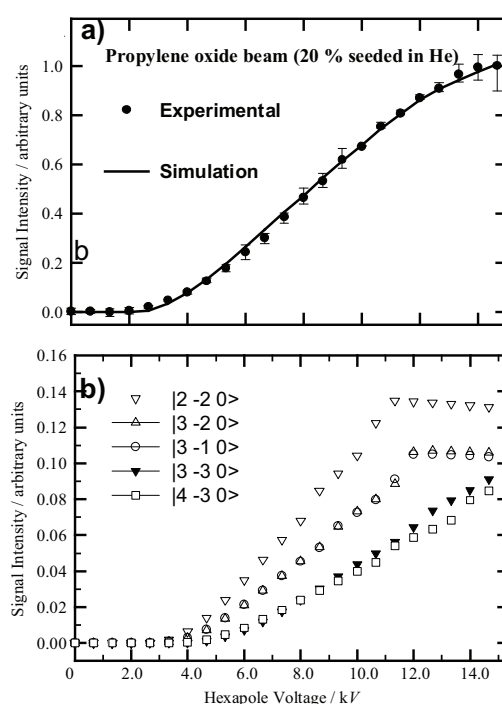


図 3 a) He シードの場合の収束曲線
b) 各回転状態の収束曲線

- (1) Brooks, P. R.; Jones, E. M.; Smith, K. *J. Chem. Phys.* **1969**, 51, 3073.
- (2) Hain, T. D.; Weibel, M. A.; Backstrand K. M.; and Curtiss, T. J., *J. Phys. Chem. A* **1997**, 101, 7674