

### 3A06

#### ヘキサポールによる非対称コマ分子の配向制御とその光解離過程

(台湾大学, 中興大学, 原子分子科学研究所, 阪大院・理, ペルージャ大学,  
Consiglio Nazionale delle Ricerche, バイヤー連邦大学)

○中村雅明, 楊 洵之, 蔡 柏宇, 笠井 俊夫, 林 金全, 蔡 徳七, Lombardi Andrea,  
Palazzetti Federico, Aquilanti Vincenzo

#### Photodissociation dynamics of hexapole-oriented asymmetric top molecules

(National Taiwan Univ., National Chung-Hsing Univ., IAMS, Osaka Univ., Università di  
Perugia, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Universidade Federal da Bahia)

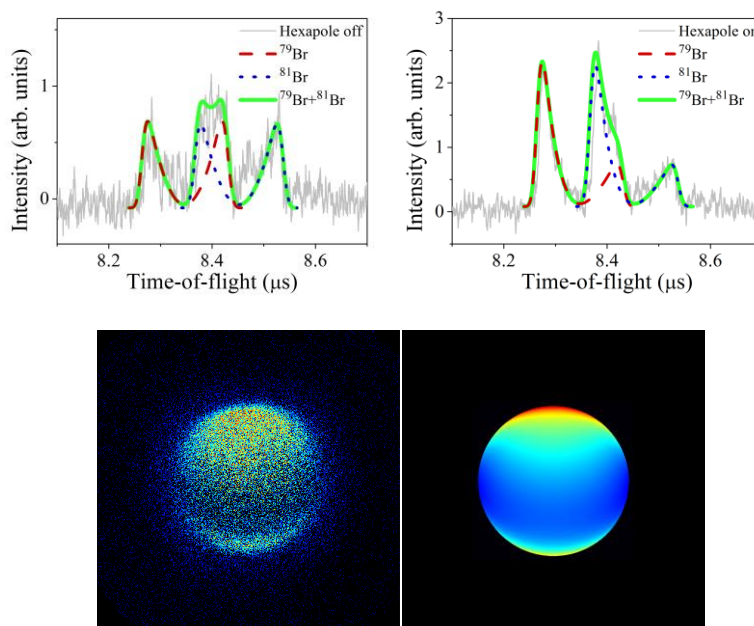
○Masaaki Nakamura, Shiun-Jr Yang, Po-Yu Tsai, Toshio Kasai, King-Chuen Lin,  
Dock-Chil Che, Andrea Lombardi, Federico Palazzetti, Vincenzo Aquilanti

偏光によって励起された化学結合が切れるとき、解離生成物の飛散方向は一様でない分布をとることがある。この解離生成物分布は、光解離に伴うエネルギーの分配や飛散と偏光の相対方向などの情報を含み、光解離過程の詳細を知るうえで非常に重要な手がかりとなる。通常であれば、光解離の対象となる分子は固相でない限り空間の中で移動・回転してランダムな配向をとっており、実験における観測結果もあらゆる配向の平均として得られるにとどまる。しかし、解離生成物分布は分子座標系に固定された遷移双極子モーメントと実験室系に固定された光の偏光ベクトルによって関係づけられるために、もし分子が一定の(ランダムでない)配向を取ったとすると分布に影響することが予想される。本報告ではこの空間的に配向した分子の光解離生成物分布から光解離における複数のベクトル相関を読み解く手法を紹介する。また、この実験的手法はより複雑な、あるいは非対称な分子の光解離を理解するうえで重要となる。したがって、本研究ではサンプルとして 2-ブロモブタンを用い、ヘキサポールによる非対称コマ分子の分子配向に成功した最初の例を示す。

実験には分子線実験用の真空チャンバーを用いた。真空チャンバーは三つのチャンバーに分かれており、それぞれにサンプルガスを放出するノズル、ヘキサポール、イオンの二次元検出器が設置されている。ノズルから放出された分子は真空への断熱膨張のために冷却され、スキマーやコリメーターを通過することで速度と方向のそろった分子線となる。分子線はヘキサポールの中を通過する際にその電場と相互作用し軌道を歪められる。この相互作用の大きさはヘキサポールに印加された電圧と分子の回転状態に依存するために、ヘキサポールの電圧を選ぶことにより検出領域に達する分子の回転状態の選別が可能となる。回転状態の選別を受けた分子線は検出領域に用意された配向電場と呼ばれる一様な電場の中で回転状態に固有の配向を呈する。このとき分子の回転状態が通常の熱平衡的な分布をしている場合は各状態の配向が打ち消しあって全体としては一様な配向になるが、回転状態選別によって通常とは異なる分布をしている場合はその限りではない。配向された分子は直線偏光レーザー光( $\lambda=234$  nm)の照射により光解離を起こし、解離生成物の Br 原子は共鳴多光子イオン化(REMPI)によりイオン化される、生じた Br イオンは引き込み電場によって MCP・蛍光スクリーン複合の二次元検出器へ加速されその飛行時間あるいは

検出位置を記録される。我々の装置では配向電場と引き込み電場は同一であり、Velocity map imaging 用のイオンレンズにより発生している。

一般的に対称コマ分子に比べて非対称コマ分子の各回転状態は互いに近接しており、ヘキサポールを用いても前者のように単一の回転状態を得るのは難しい。とはいえ、今回用いたサンプルの 2-ブロモブタンの分子線はヘキサポールによる集束を良好に受けた。すなわち、非熱平衡的な回転分布状態が達成されたことが期待できる。検出領域での実際の分子配向を調べるために飛行時間(TOF)計測を行った(図 1)。2-ブロモブタンの当該波長(234 nm)での光解離は偏光ベクトルに平行な方向に生成物が多く分布することが分かっている( $\beta=1.85$ )。このため励起光の偏光を TOF 軸に水平に設定したとき TOF 軸に沿って前方に飛散した成分と後方に飛散した成分の二つのピークが観測されると予想される。TOF の測定の結果はこれを支持しており、三つのピークに見えるのは Br が二つの同位体( $^{79}\text{Br}$ ,  $^{81}\text{Br}$ )が存在するためである。解析の結果二つの同位体それぞれのピークの一部が重なっているために三つのピークとして表れていることが明らかになった。また、ヘキサポールに電圧をかけていない時には等方的な配向を取るために二つのピークはほぼ等しいが、一定の電圧をかけた時には前方へ飛散した成分のピークが大きく増幅された。この結果は 2-ブロモブタン分子中の Br 部分が前方へ配向したことを示唆している。次にイオンイメージング法により、配向した 2-ブロモブタンの光解離生成物 Br の飛散角度分布を調べた(図 2)。測定の際、通常は鉛直方向に設定する偏光を斜め 45 度 TOF 軸へ傾くように設定した。これは鉛直方向の場合、TOF 軸に平行な配向軸と直行し配向の効果がイメージ上で最少となるためである。得られたイメージは上下に強い異方性がみられ、これは分子の配向がなければ見られない特徴である。シミュレーションによるフィッティングも行い、二つはよい一致を示した。シミュレーションには分子配向を含めた複数のベクトル相関を考慮しており、配向度は TOF の結果から見積もった結果を反映させている。フィッティングの結果から 2-ブロモブタンのような非対称な分子の光解離に関する情報を読み解くことができる。



上段：図 1 TOF 測定の結果 下段：図 2 イオンイメージとシミュレーションの結果