

## 配向状態を選別したハロタン分子の光解離ダイナミクス

<sup>1</sup>阪大院理, <sup>2</sup>台湾大学○蔡 徳七<sup>1</sup>, 中村 雅明<sup>2</sup>, 笠井 俊夫<sup>2</sup>, Lin King-Chuen<sup>2</sup>

## Photodissociation Dynamics of Oriented Halothane

○Dock-Chil Che<sup>1</sup>, Masaaki Nakamura<sup>2</sup>, Toshio Kasai<sup>2</sup>, King Chuen Lin<sup>2</sup>,<sup>1</sup>Department of Chemistry, Osaka University, Japan<sup>2</sup>Department of Chemistry, Taiwan University, Taiwan

**【Abstract】** The orientation state of the halothane molecule, which is a chiral molecule, was selected using a hexapole electric field. The reaction mechanism is elucidated in detail by examining the vector correlation between the laser polarization axis and the recoil direction of the product under the condition defining the molecular orientation. The scattering distribution of the product was measured by ion imaging technique. In this study, the formation mechanism of Br atom in the ground state and Br atom in the excited state was investigated as the product. Similar measurements were also carried out for the Cl atom formation competitively generated by photoconduction. We discuss the reaction pathway from photo excitation to product after scattering distribution of product and reaction branching ratio of product.

**【序】** 偏向レーザーを用いて分子を励起し化学結合を切断した場合、生成物の散乱分布は一様でない場合がある。解離生成物の散乱分布は、光解離にともなうエネルギー分配や励起状態の寿命、分子が光を吸収する遷移モーメントの方向などの情報を含み、光解離過程を詳細に知るうえで重要な手掛かりとなる。通常、解離生成物の散乱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向ベクトルによって関係づけられるために、もし分子がランダムな配光を取ったとすれば散乱分布に影響すると考えられる。本報告では分子を空間内に配向した状態で光解離生成物の散乱分布を観測し、複数のベクトル相関を読み解く手法を紹介する。本研究では、対象軸を持たないキラル分子であるハロタン ( $\text{CF}_3\text{CHBrCl}$ ) 分子の光解離の研究を実施した。ハロタン分子は紫外光を吸収することで Br 原子と Cl 原子が競争的に生成する、両者の散乱分布を同時に計測することでそれぞれの生成物の反応機構を詳細に解明する。

**【実験】** 実験装置図を図1に示す。六極不均一電場を用いてハロタン分子の回転状態を選別したのち、均一電場内で分子の配向状態を選別した。紫外光レーザーは集光し分子線に垂直に照射した。生成したイオンは電場により加速し、MCP・蛍光スクリーンのイメージング計測システムで測定した。

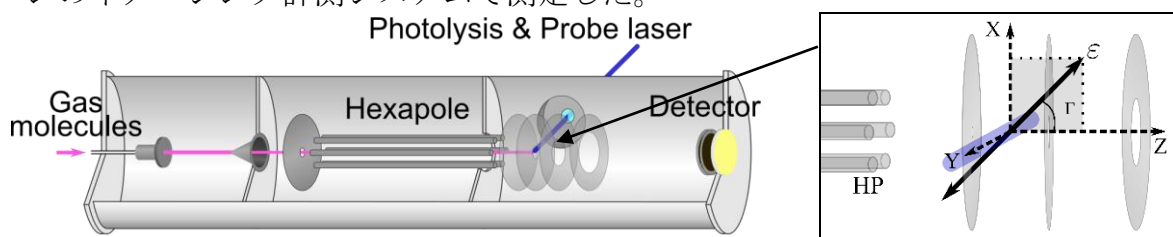


図1.六極電場を用いた配向状態を選別した分子の光解離実験装置

**【結果・考察】** 図2に六極電場の印加電圧に対する観測された信号強度の変化を示した収束曲線を示す。電場の印加電圧の増大とともに分子線強度が増大している。この結果を電場内の分子の軌跡計算を実施することでレーザー光との交点での分子の配向状態分布を求めた。

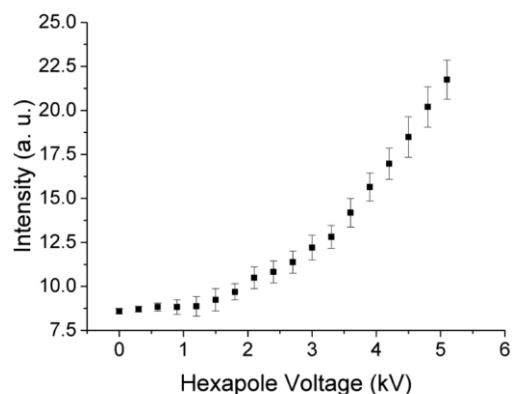


図2. ハロタン分子の収束曲線  
図2. ハロタン分子の収束曲線  
観測する理由から、レーザー光の偏向方向を分線進行方に対して45度照射した。観測したそれぞれのイメージはバックグラウンド信号を計測し引いている。

図3に配向状態を選別しない状態で観測したBr原子とBr\*原子の光解離散乱分布の結果を示す。実験では分子の配向状態分布を

観測された画像を解析することでBrおよびBr\*生成の異方性パラメーター( $\beta$ )はそれぞれ、0.6および1.5であることが分かった。即ち、両者とも平行遷移であることが示された。230nmの光解離では3つの解離ポテンシャルが関与することが知られている。即ち、 $^1Q_1$ ,  $^3Q_0$  および  $^3Q_1$  である。ここで $^3Q_0$ のみが平行遷移である。Br\*の $\beta$ 値が2に近いことから、Br\*は $^3Q_0$ のポテンシャル局面に励起されていると考えられる。一方、Br原子生成は三つのエネルギー局面が混ざり合った励起となっていると考えられる。

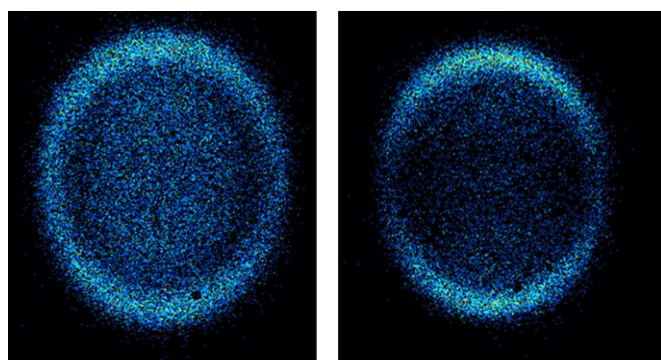


図3. 無秩序状態の分子から生成したBrおよびBr\*の散乱分布

より詳細な議論を行うため、分子の配向状態を選別した条件下で光解離実験を行った。結果を図4に示す。観測されたイメージは上部が下部に比べ強く観測されていることがわかる。これは分子が配向している条件下で45度方向にレーザーの偏向を照射したために表れた結果である。この結果から、分子が実験室系に対して配向していることが確認された。本講演では、Cl原子に対しても同様の実験を行い、結果を発表する。

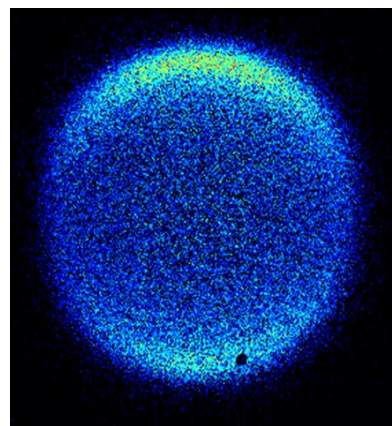


図4. 分子の配向状態を選別した条件下で観測したBr\*の

今後、レーザー光の偏向ベクトルと分子座標軸、生成物の散乱分布のベクトル相関からそれぞれの生成物の反応機構を詳細に解明する。

**【参考文献】**

[1] M. Nakamura *et al.* *J. Phys. Chem.* **147**, 13917 (2017).  
[2] M. Nakamura *et al.* *Phys. Chem. Chem. Phys.* In press (2018).