

イオン同時計測法による 3,3,3-トリフルオロプロペンの 内殻励起と解離ダイナミクス

丁田充, 岡田和正, 末光篤, 足立純一, 柳下明
広島大院理, 高エネ機構

光励起された炭化水素化合物中の水素原子は、素早く分子内を移動する。内殻領域においても、例えば $\text{CF}_2=\text{CH}_2$ の $\text{C}1s$ 励起で解離イオンとして CHF^+ 等が生成することが知られている。しかしながら、それらの解離イオンを導く親イオンの幾何構造に関する直接的な研究はほとんど行われていない。そこで我々は内殻励起後の分子の幾何構造の変形と解離について研究するため、3,3,3-トリフルオロプロペンの内殻励起に着目し、CO-VIS 装置を用いた実験を始めた。今回は内殻励起スペクトルと解離イオン対生成のダイナミクスについて報告する。

実験はアンジュレータービームライン BL-2C にて行った。内殻励起後に生じる解離イオン種の観測には、リニア型飛行時間型質量分析計(L-TOF)を用いた。解離で同時生成する2つのイオンの運動量相関スペクトルを得るため、最初にイオン・イオン・コインシデンス(PIPICO)マップを作成した。フッ素内殻領域では 688.6、691.5、715.0 eV の3点で、炭素内殻領域では 296.5、314.6 eV の2点で測定した。

飛行時間スペクトルから代表的な解離イオンとして CH^+ 、 F^+ 、 C_2H_m^+ ($m=1-3$)、 CF^+ が生成していることが分かった。それらの解離イオンの相対収量はフッ素内殻領域と炭素内殻領域で異なり、フッ素内殻領域ではエネルギーによっても違いが見られた。また CF_3^+ の収量は炭素内殻領域で比較的多くなった。残念ながら、PIPICO スペクトルには期待された $\text{CF}_3^+/\text{CH}_3^+$ のイオン対は検出されなかったが、一方で興味深いイオン対の生成が確認された。すなわち、 $\text{C}_2\text{H}_m\text{F}^+/\text{CF}_2^+$ ($m=1-3$) および $\text{CF}^+/\text{C}_2\text{H}_m\text{F}^+$ ($m=0,1$) の解離イオン対の相関であり、これらはフッ素原子の転位で生じると考えられる。これら 5 種の相関で生成される解離イオン対から、C3-C2 間で解裂が起こっていると結論づけられる。また、これら 5 種の解離イオン対相関マップ上での島の傾きは -1 であった。不足している水素およびフッ素原子は電荷分離前に放出されていることが分かる。すなわち、前者の解離イオンの生成について次の経路であることが分かる。

