

## 分子線中のアルキルベンゼンの紫外光電子・ペニング電子分光

(電通大院情報理工) ○小野塚 涼太・高橋 涼・清水 茂之・山北 佳宏

Ultraviolet photoelectron and Penning ionization electron spectroscopy of alkylbenzenes in a molecular beam (*Graduate School of Informatics and Engineering, The University of Electro-Communications*) ○ Ryota Onozuka, Ryo Takahashi, Shigeyuki Shimizu, Yoshihiro Yamakita

He I ultraviolet photoelectron spectroscopy (UPS) and He\*(2<sup>3</sup>S) Penning ionization electron spectroscopy (PIES) were performed to investigate the electronic interactions between the benzene ring and the alkyl chain in alkylbenzenes and the exterior electron density (EED) distributed outside the molecular surface. The PIES experiments reflect the collision energy dependence as collision energy  $E_c \approx 100$  meV and 140 meV for effusive gas or He seeded molecular beam (stagnation pressure 550 Torr, orifice diameter 20  $\mu$ m), respectively. The calculations were performed at the OVGF/6-31++G(d,p) level using an abundance ratio of 85% vertical structure **V** and 15% planar structure **P** estimated from the free energy. The presence of isomers was not considered in the previous UPS study. Intensity differences and negative peak shifts of PIES bands were explained by EEDs and interaction potentials with He\*.

**Keywords** : Penning Ionization; Photoionization; Electron Spectroscopy; Alkylbenzene; Supersonic Molecular Beam

アルキルベンゼンにおけるベンゼン環とアルキル鎖との間に働く電子的相互作用と分子表面外に分布する電子密度 (EED) を調べるため、He I 紫外光電子分光 (UPS) と He\*(2<sup>3</sup>S) ペニング電子分光 (PIES) を行った。PIES の実験は、試料を漏出気体あるいは He シード分子線 (押し圧 550 Torr、オリフィス径直径 20  $\mu$ m) として導入したため、それぞれ衝突エネルギー  $E_c \approx 100$  meV, 140 meV として衝突エネルギー依存性を反映する。計算は、自由エネルギーから見積もられる垂直構造 **V** 85%、平面構造 **P** 15% の存在比を使って OVGF/6-31++G(d,p) のレベルで行った。UPS の先行研究<sup>1)</sup>では異性体の存在は考慮されていなかった。

Fig. 1 に UPS と分子線条件での PIES を示す。イオン化エネルギーは平均 0.22 eV、最大 0.38 eV の誤差で再現された。(c) の  $\pi$  軌道 PIES バンド 1, 2 は (a) の UPS バンドに比べて強度比が逆転し、負方向にシフトしていた。これは、分子表面の EED と He\* と標的分子との  $\pi$  軌道領域引力的相互作用による影響である。バンド 14 の軌道でとくに **P** と **V** でのアルキル鎖と環の位相による差異が見られた。

1) L. Klasinc, B. Kovač, and H. Güsten, *Pure & Appl. Chem.*, **1983**, 55, 289.

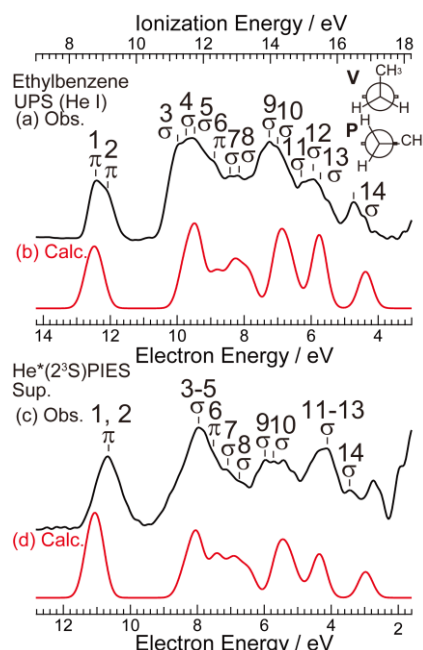


Fig. 1. (a) He I UPS, (b) calculated UPS, (c) He\*(2<sup>3</sup>S) PIES under a supersonic beam condition, and (d) calculated PIES for ethylbenzene. The calculated spectra were synthesized from OVGF ionization energies and EEDs.