

## シード分子線中のベンゼンの配向に着目した ペニングイオン化反応の古典トラジェクトリ計算

(電通大情報理工<sup>1</sup>・電通大院情報理工<sup>2</sup>) ○本吉 順<sup>1</sup>・高橋 涼<sup>2</sup>・山北 佳宏<sup>2</sup>

Classical trajectory calculations for Penning ionization focusing on the orientation of benzene in a seeded molecular beam (<sup>1</sup>*School of Informatics and Engineering, University of Electro-Communications*, <sup>2</sup>*Graduate School of Informatics and Engineering, University of Electro-Communications*) ○Jun Motoyoshi,<sup>1</sup> Ryo Takahashi,<sup>2</sup> Yoshihiro Yamakita<sup>2</sup>

Keywords: Supersonic Molecular Beams; Penning ionization; Trajectory calculations; Molecular orientation; Seeded molecular beam

The orientation distribution of benzene in a He-seeded supersonic molecular beam was studied by classical trajectory calculations for Penning ionization of the metastable excited He\*(2<sup>3</sup>S) atom and the target benzene molecule. Experimental results indicate that Penning ionization cross-sections  $\sigma$  of  $\pi$  orbitals ( $\sigma$  orbitals) are smaller (larger) in the case of the supersonic beam compared to the effusive gas. This propensity is due to that the benzene plane is aligned along the direction of molecular beam by collisions with the He seed gas. Calculations were performed assuming that the orientation distribution function is expressed as  $F(\theta) = \sin^2\theta$ , where  $\theta$  is the angle between the molecular beam direction  $z$  and the normal vector  $\mathbf{n}$  of the benzene plane. 1000 Trajectories were calculated for the orientation angle in a range  $\theta = 0\text{--}90^\circ$  with a  $10^\circ$  increment assuming rotational temperature 0 K. Intermolecular interactions were calculated by replacing He\*(2<sup>3</sup>S) with Li. The weakening of the  $\pi$  orbital bands can be explained by the frisbee-like orientation distribution  $F(\theta)$ . Disagreements for bands 6,10 could be due to the limit of the Li approximation.

準安定励起原子  $A^*$  と標的分子  $M$  によるペニングイオン化 ( $A^* + M \rightarrow A + M^+ + e$ ) の古典トラジェクトリ計算で、超音速分子線にシードされたベンゼンの配向分布を研究した。これまでに赤外分光で研究されているが<sup>1)</sup>、十分な情報が得られていない。Fig. 1(a)は、He\*(2<sup>3</sup>S)とベンゼンの実験ペニングイオン化断面積 $\sigma$ を示す。超音速分子線の $\pi$ 軌道のバンドは漏出気体の場合に比べて弱く、 $\sigma$ 軌道のバンドは強くなる。この傾向は、シード気体 He の衝突で、ベンゼン環平面が分子線進行方向に揃った配向分布に近くなったためと考えられる。Fig. 1(b)は、分子線方向  $z$  とベンゼン環平面の法線ベクトル  $\mathbf{n}$  のなす角を $\theta$ としたとき、配向分布関数が  $F(\theta) = \sin^2\theta$ で表されると仮定したときの計算結果である。 $\theta = 0 \sim 90^\circ$ まで $10^\circ$ 刻みの角度について、回転温度を0 Kの条件で1000本の古典トラジェクトリ計算を行い、 $F(\theta)$ の重みづけで足し合わせた。分子間相互作用は He\*(2<sup>3</sup>S)を Li で置き換えて計算した。計算は、バンド 6,10 を除く実験結果を再現した。つまり、frisbee飛行のような配向分布  $F(\theta)$ によって説明できる。バンド 6,10 の傾向が再現されないことは、He\*と分子との相互作用とイオン化確率に対する近似が不十分なことによると考えられる。

1) F. Pirani, M. Bartolomei, V. Aquilanti, M. Scotoni, M. Vescovi, D. Ascenzi, D. Bassi, and D. Cappelletti, J. Chem. Phys. **119**, 265 (2003).

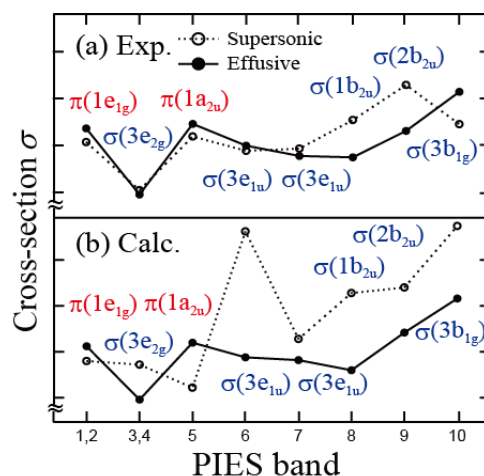


Fig. 1. (a) Experimental and (b) calculated Penning ionization cross-sections  $\sigma$ .