

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		反応物と全生成物の状態解析による光反応ダイナミクスのレーザー分光研究			
研究テーマ (欧文) AZ		Photoreaction dynamics study based on laser spectroscopy of reactants and products			
研究代表者 氏名	カタカナ CC	姓) マツダ <sup>1</sup>	名) ヨシユキ	研究期間 B	2011年11月～2013年3月
	漢字 CB	松田	欣之	報告年度 YR	2013 年
	ローマ字 CZ	Matsuda	Yoshiyuki	研究機関名	東北大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		東北大学大学院理学研究科化学専攻			
概要 EA (600字～800字程度にまとめてください。)					
<p>本研究課題では、研究代表者が独自開発した真空紫外光イオン化検出赤外解離分光法の応用による、気相中の分子およびクラスターの光反応ダイナミクスの研究手法を開発した。この方法では、真空紫外光と赤外光の入射時間を変えることにより、光イオン化前後の反応物と生成物の振動分光による構造や状態の解析が可能である。本研究の第一段階として、この方法をトリメチルアミン二量体の光イオン化ダイナミクス研究へ応用した。中性および正イオンのトリメチルアミン二量体の赤外分光および量子化学計算に基づく理論的な反応経路探索を併せて用いることにより、トリメチルアミン二量体正イオンの異性化反応経路を明らかにした。その結果、分散力で結合した中性のクラスター構造から、イオン化によりメチル基のCHがプロトン供与基として働くプロトン移動型構造へ異性化することがわかった。</p> <p>本手法では生成物を真空紫外光イオン化検出により観測するため、質量分析技術と組み合わせることにより、光反応過程における全解離生成物をサイズ選別して観測することができる。さらに真空紫外光イオン化検出赤外解離分光法、タンデム型質量分析技術、量子化学計算に基づく反応経路探索を組み合わせることにより、光励起によって誘起される反応、解離過程を多段階で研究することが可能である。これらの方法論の組み合わせによる光反応ダイナミクスの研究手法の確立およびその実証が本課題の最終目標である。それら方法を組み合わせた研究法を、ジエチルエチルエーテル二量体に応用し光イオン化によって誘起される異性化反応および多段階の解離過程を明らかにした。この結果により、本研究課題で目標である反応物と全生成物の状態解析による光反応ダイナミクス研究手法の原理を実証した。</p>					
キーワード FA	レーザー分光	クラスター	真空紫外光イオン化	赤外分光	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード <sup>2</sup> TA					研究課題番号 AA									
研究機関番号 AC					シート番号									

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	～	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	～	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	～	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	

欧文概要 EZ

A spectroscopic approach for photo-induced reaction dynamics has been developed by use of the spectroscopy with the vacuum-ultraviolet photoionization detection. This method enables us to perform the size-selective infrared spectroscopy for precursors and products in photo-induced reactions, respectively. With the method, the isomerization reaction of trimethylamine dimer in its photoionization process has been elucidated. After the photoionization, the ionized trimethylamine dimer isomerizes to the proton-transferred structure where proton from the methyl group of the ionized moiety is transferred to the other neutral moiety.

Combined with the tandem mass spectrometry, we can also investigate multi-steps of photo-induced reactions. The combination of the IR spectroscopy, tandem mass spectrometry, and theoretical reaction path search has been made to investigate the photoionization dynamics of the diethylether dimer. As the result, we have clarified that the multistep processes of isomerization and dissociation reactions of the photo-ionized diethylether dimer.

These results demonstrate the photo-induced reaction dynamics approach developed in this study.