

ポテンシャル曲面の化学(5)

あとで、クイズが出ます。
できるだけ、メモしておくことを、
オススメします。



7月22(金)10:15~12:00

担当： 大野 公一

1. 化学とポテンシャル曲面

2. 化学結合ができる仕組み

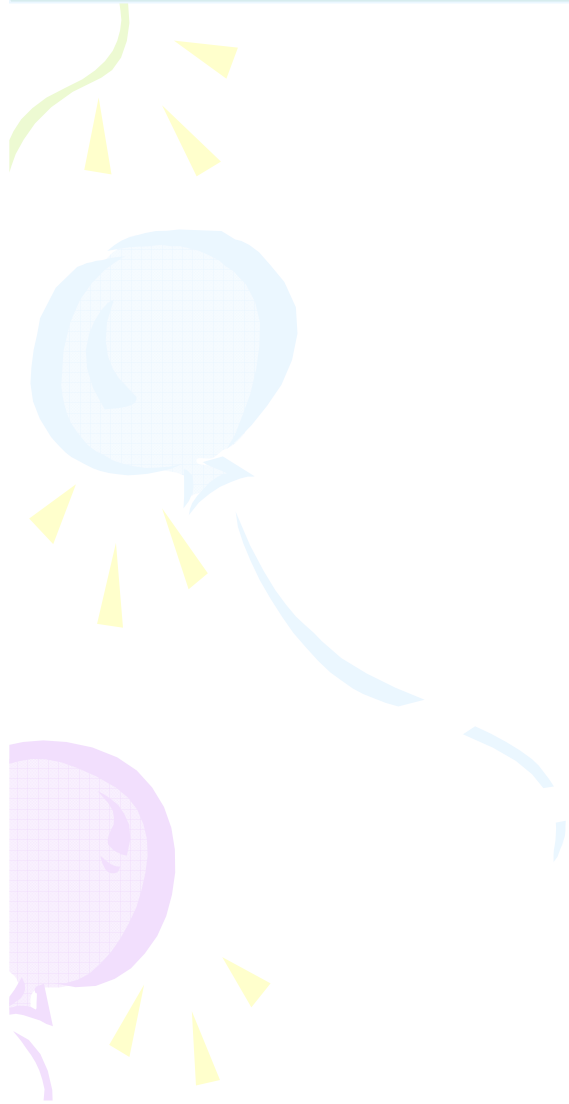
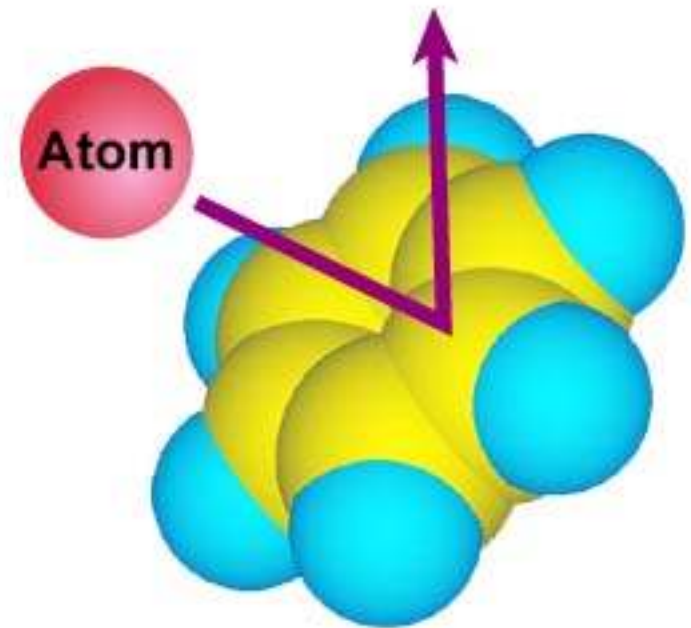
3. 分子内ポテンシャルと分子振動

4. 分子間ポテンシャル

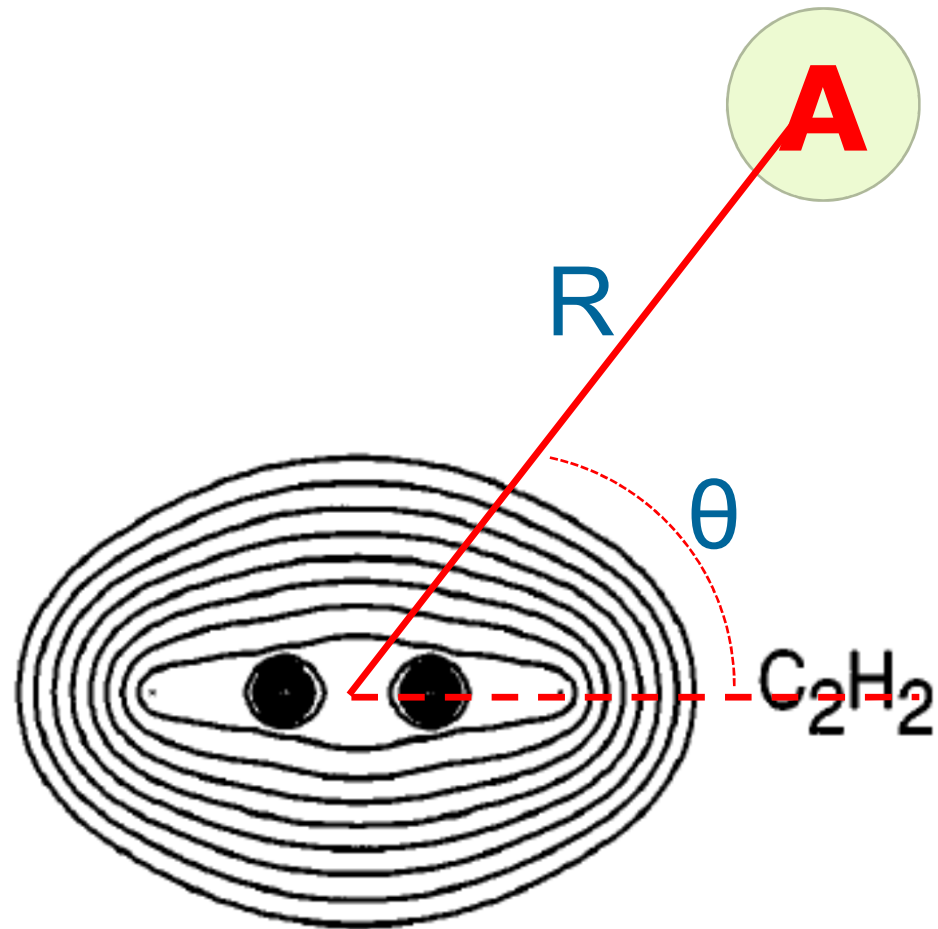
5. 原子と分子のポテンシャル

6. 化学反応とポテンシャル

原子をプローブとして用いて
分子を見るとどんな形に見えるだろうか？

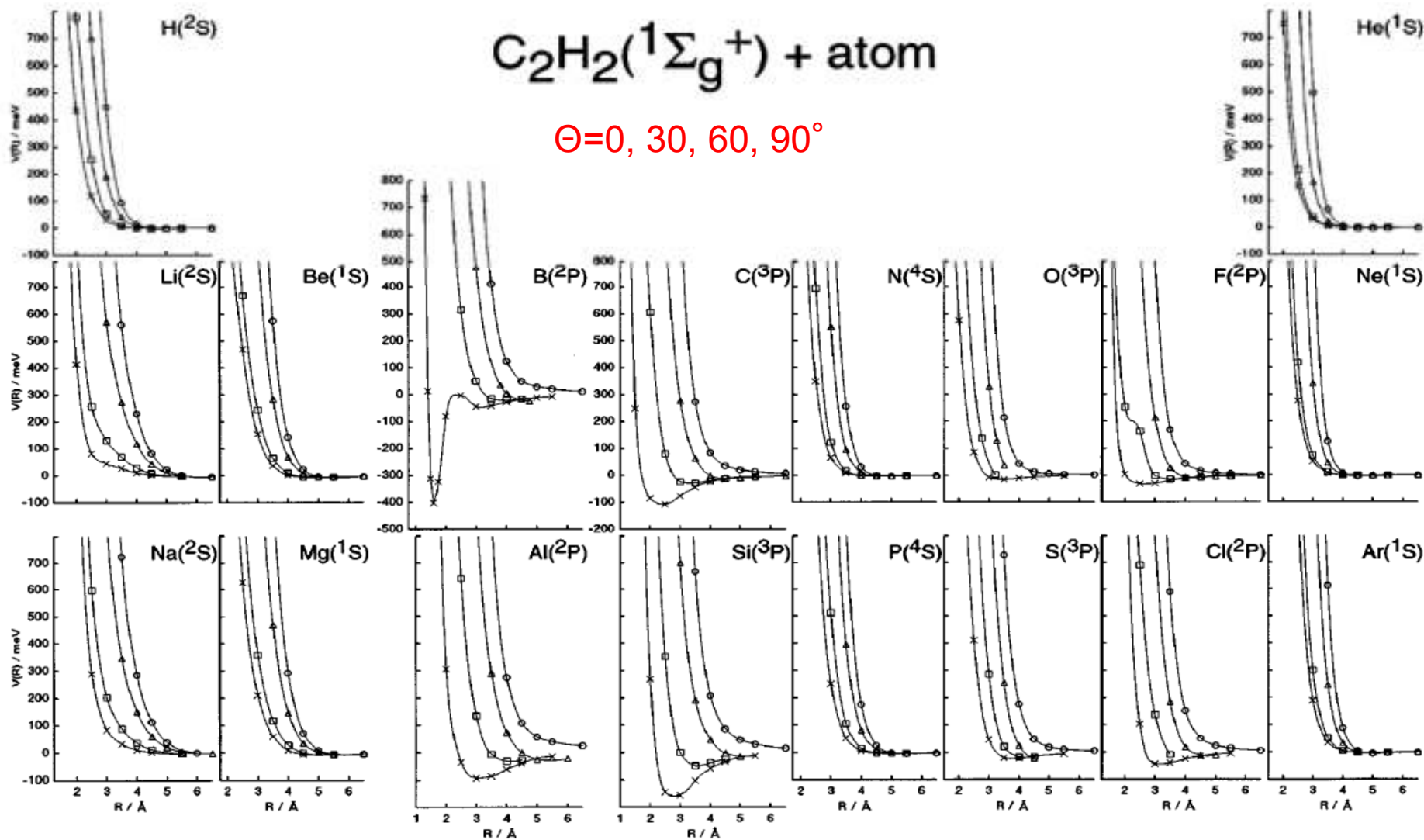


atom原子で分子をプローブする！

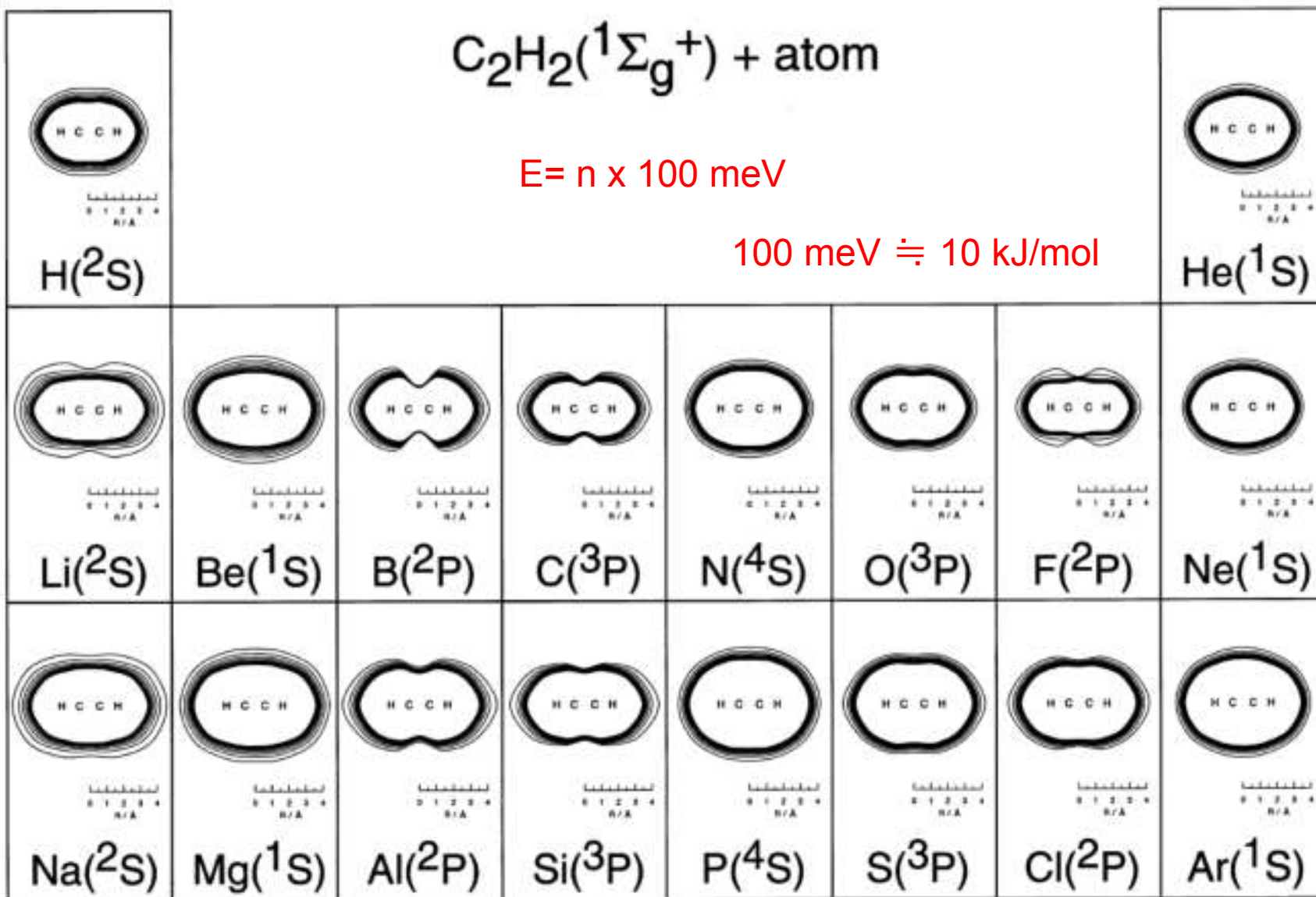


理論計算で、
Rと θ を変えながらエネルギーを調べる！

HからArまでの原子で調べた、 C₂H₂と原子の間のポテンシャル



AtomでプローブしたC₂H₂の外形





Atomで分子をプローブする実験？

- 接触実験 (AFM) (STM)
- 合体実験 (Cluster分光)
- 衝突実験
分子線散乱実験
イオン化電子分光 (PIES)

原子どうしの相似(そっくりさん)



Heの励起原子He*を用いた衝突イオン化

Penning Ionization

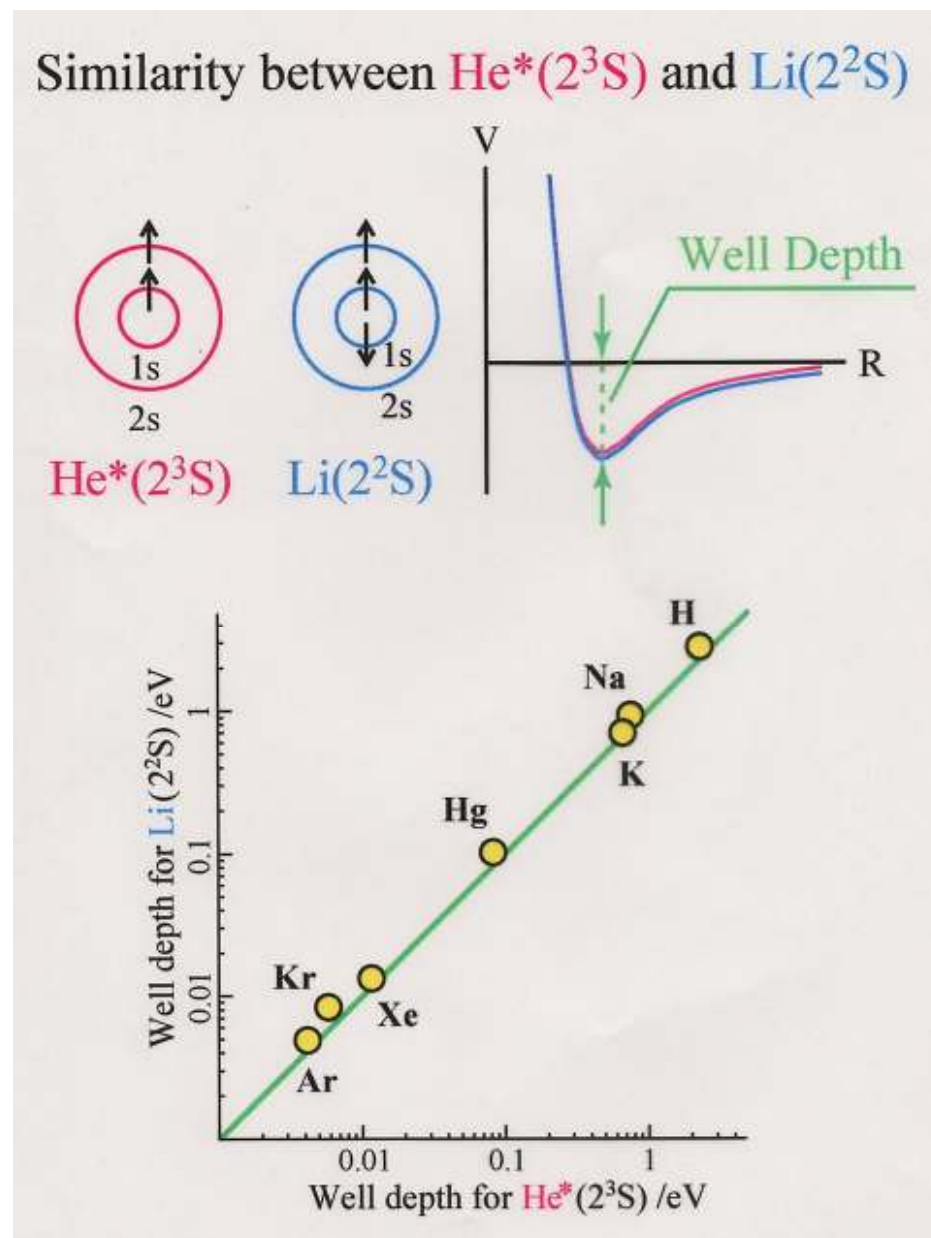


He*はLiと同様のポテンシャルを感じながら分子とぶつかって、分子をイオン化させる！

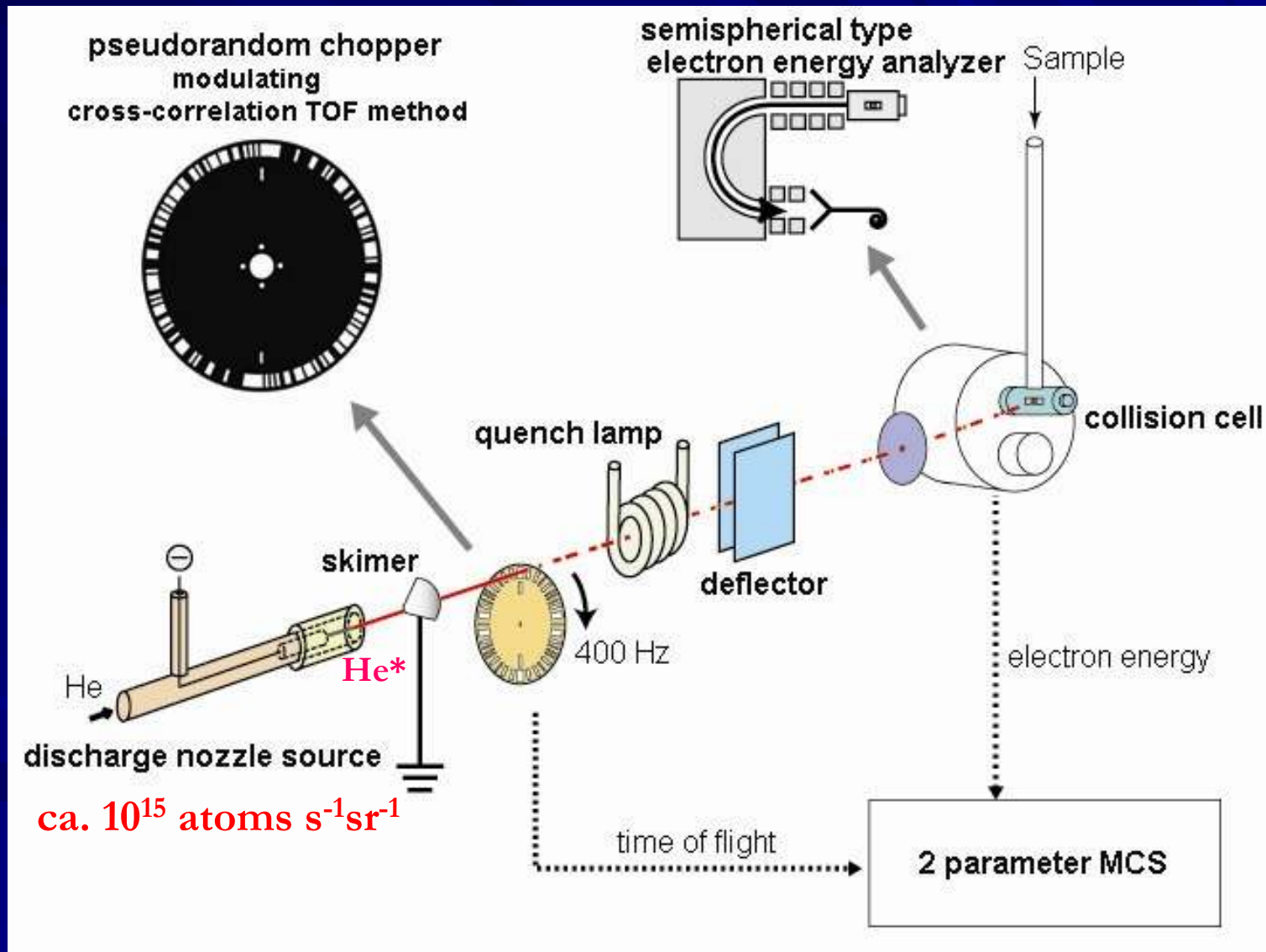
Entrance Potential for Reactants

can be obtained as
ab initio model
potentials using a Li
atom in place of an
excited He* atom,
based on the well
known similarity
between He* and Li.

*Both of them show
very similar well
depths.*

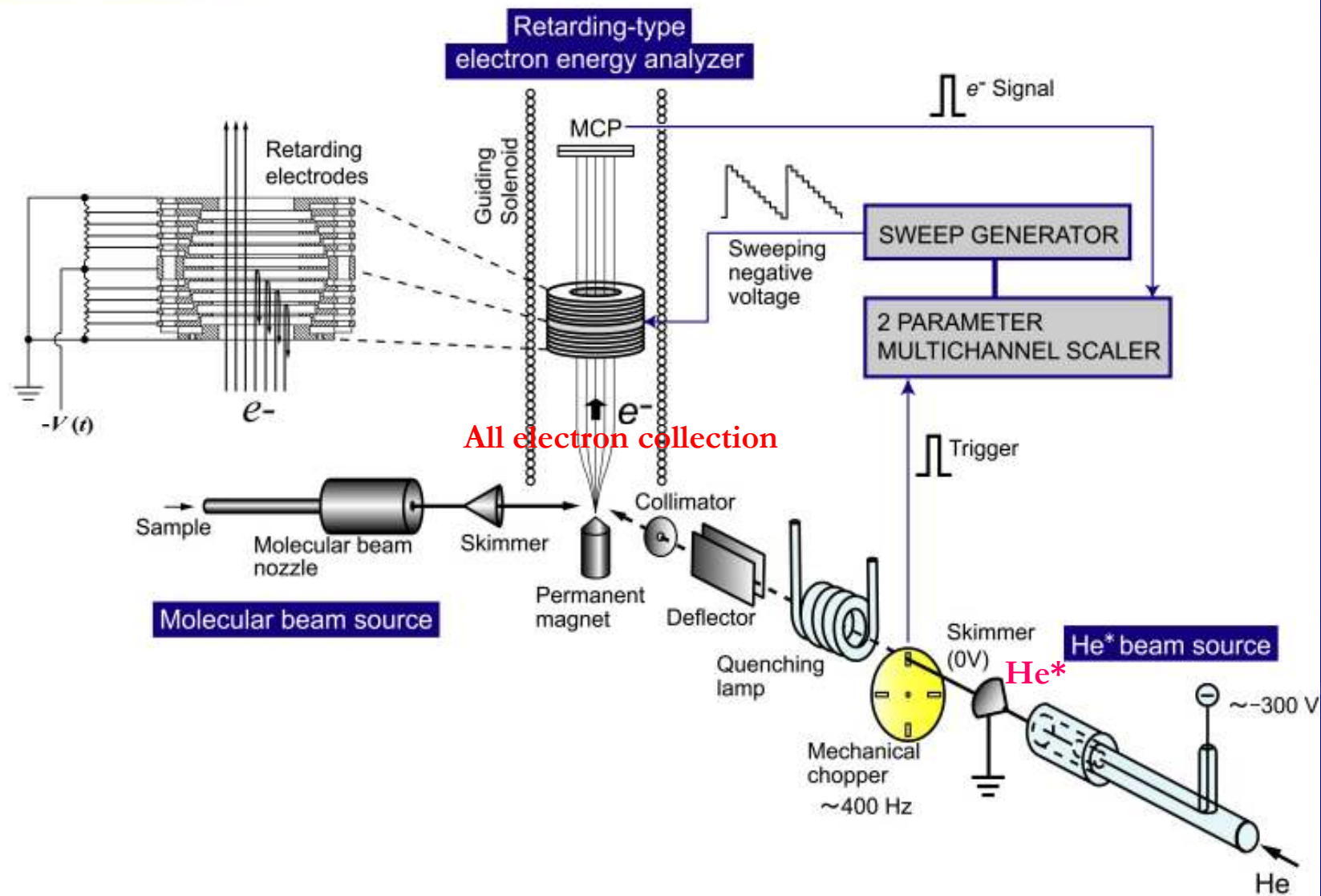


2D-PIES Apparatus



Crossed Molecular Beam 2D-PIES

Experimental setup

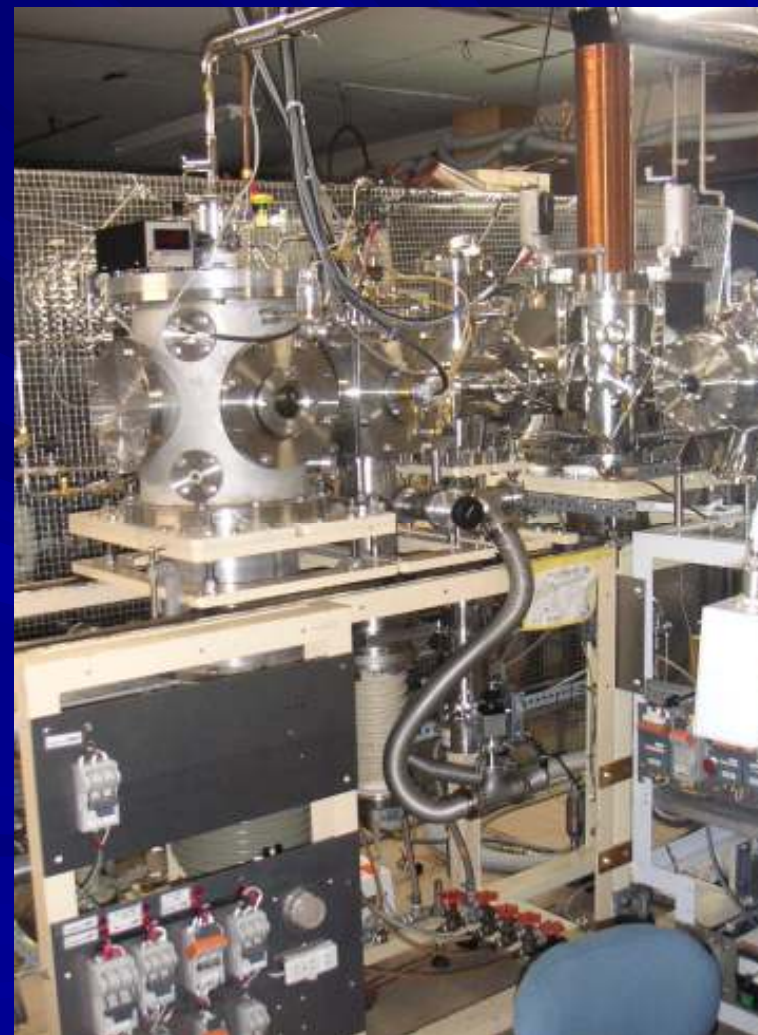


2D-PIES装置

速度分解・角度分解
ペニングイオン化電子分光装置

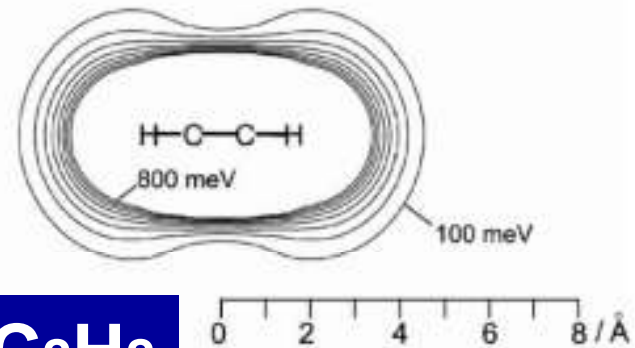
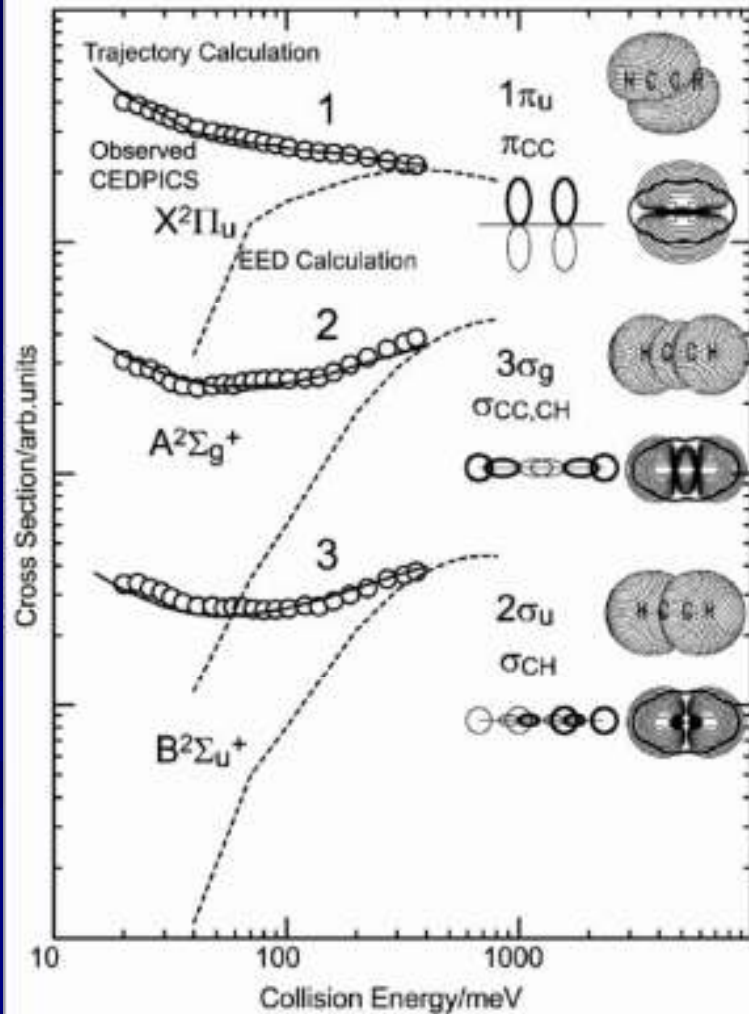


交差分子線速度分解磁気ボトル
ペニングイオン化電子分光装置

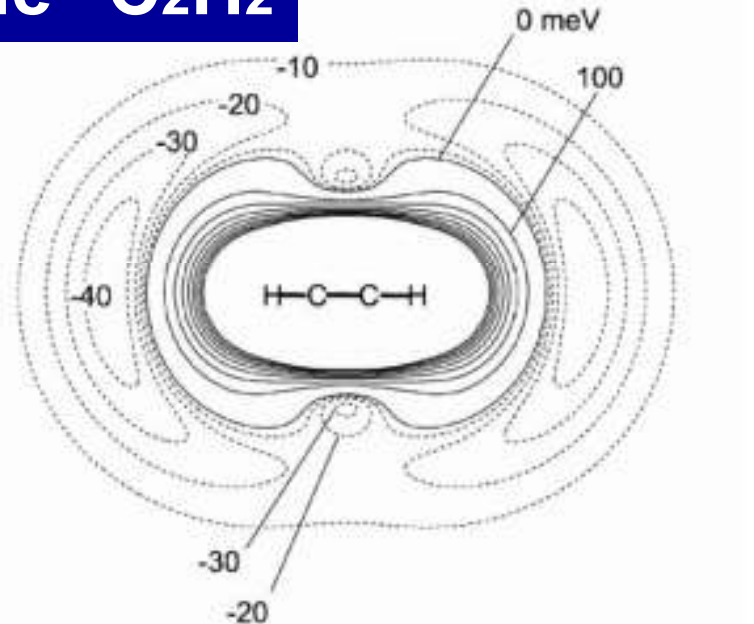


衝突イオン化実験で見た アセチレン分子の外形

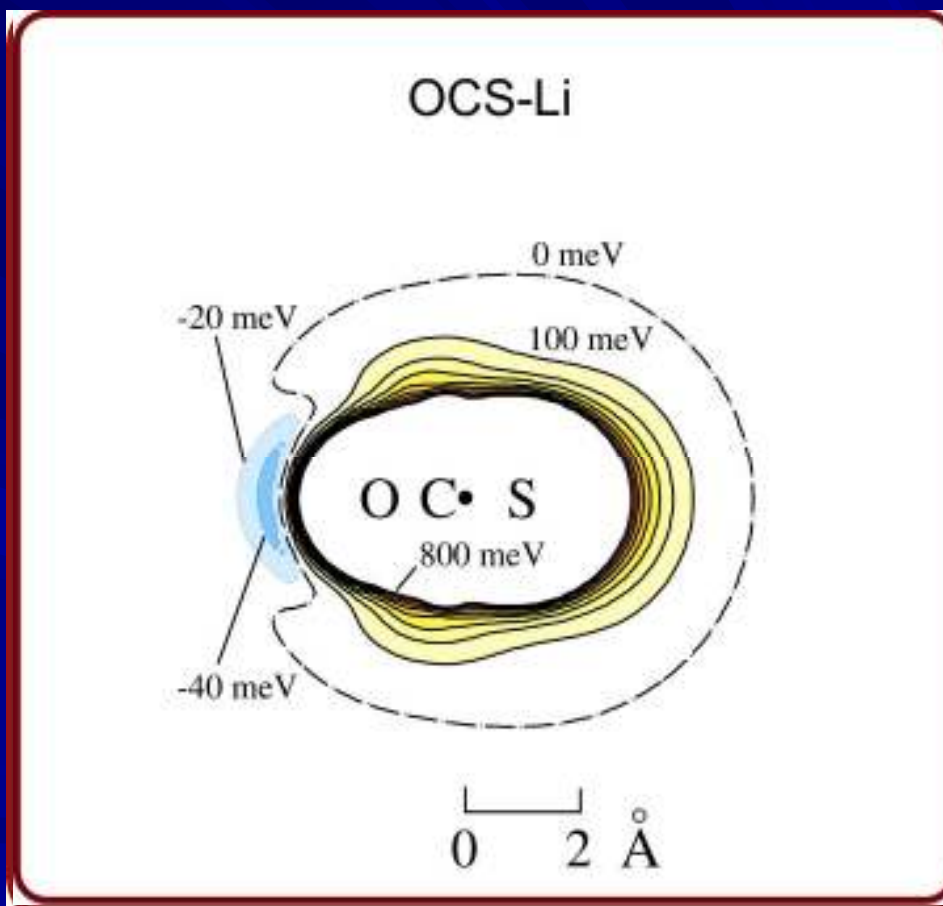
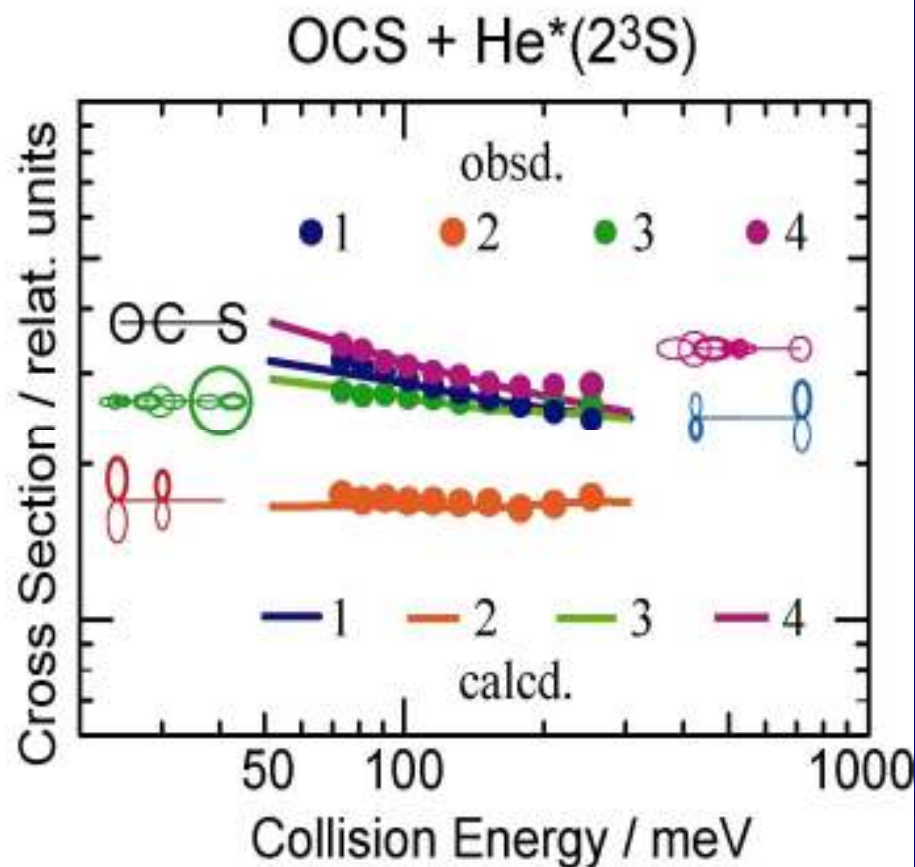
Li-C₂H₂



He*-C₂H₂



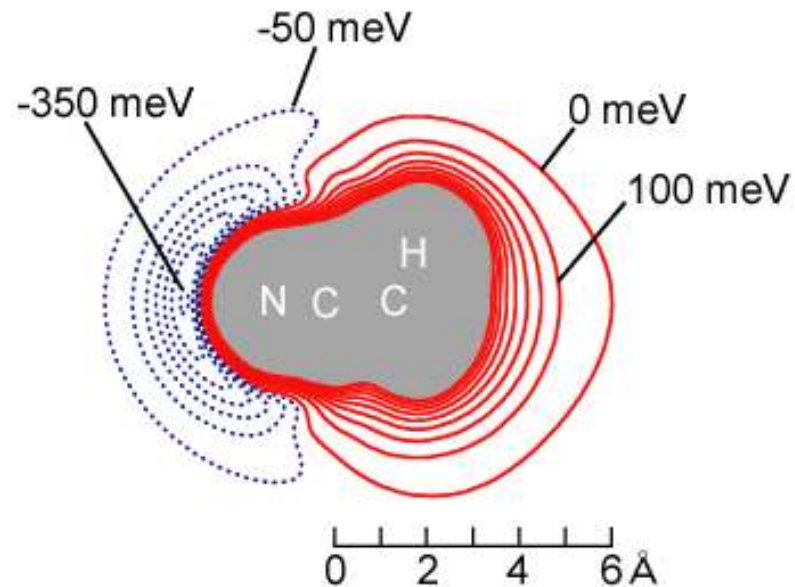
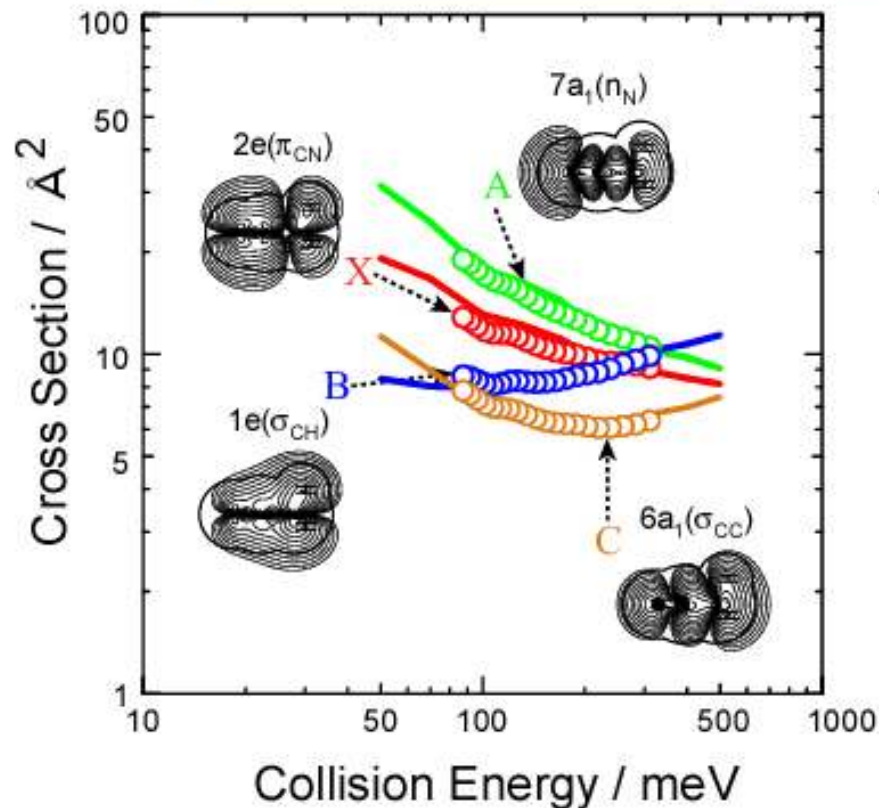
Interaction Potential for OCS /Li, He*



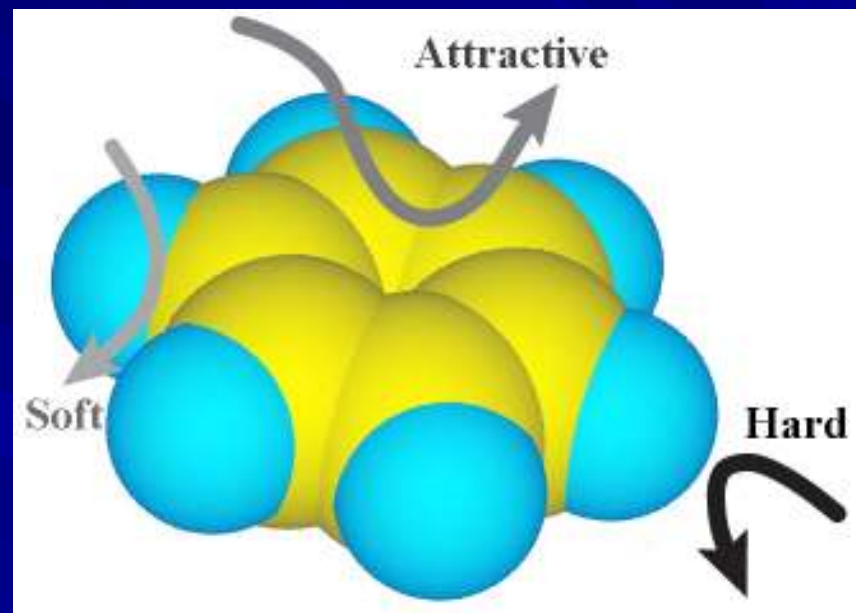
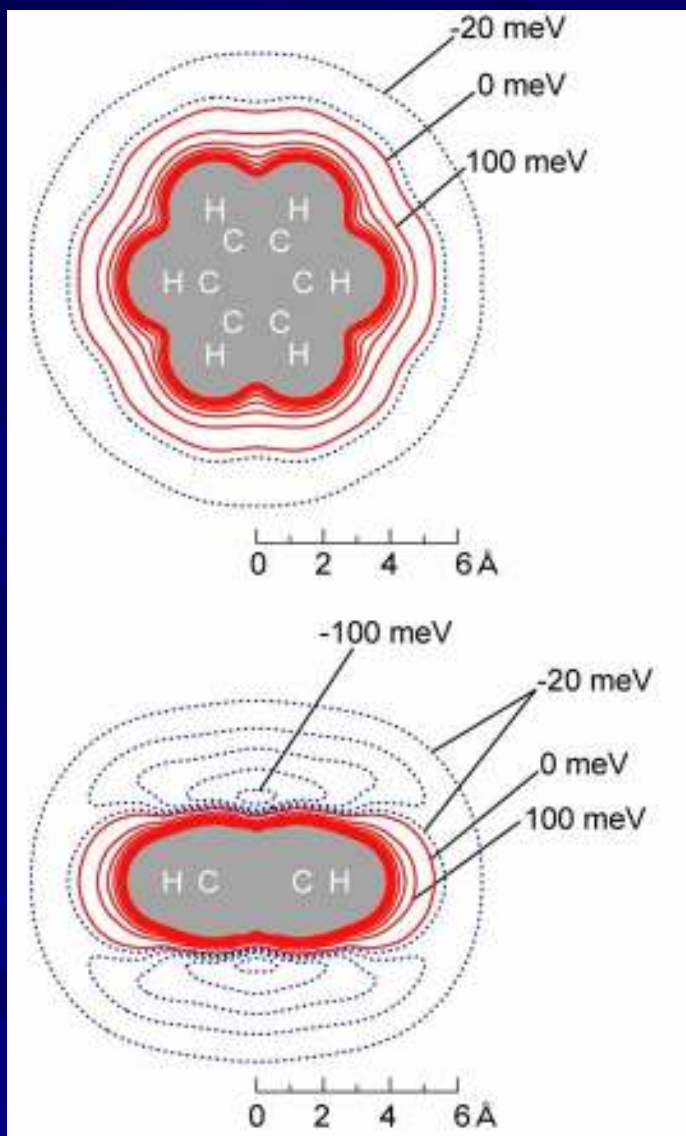
CH₃CN分子とHe*の相互作用ポテンシャル

He*(2³S)+CH₃CN CEDPICS

Interaction potential energy of He*(2³S)+CH₃CN



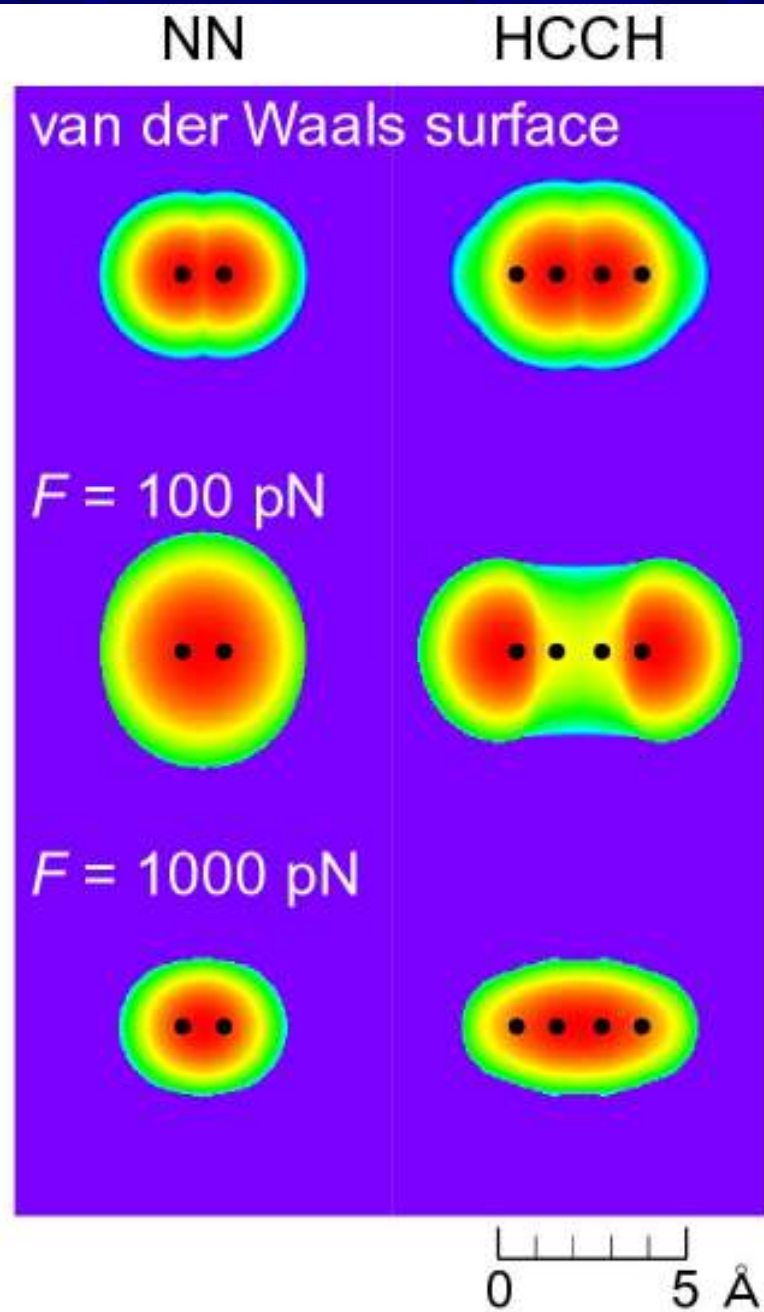
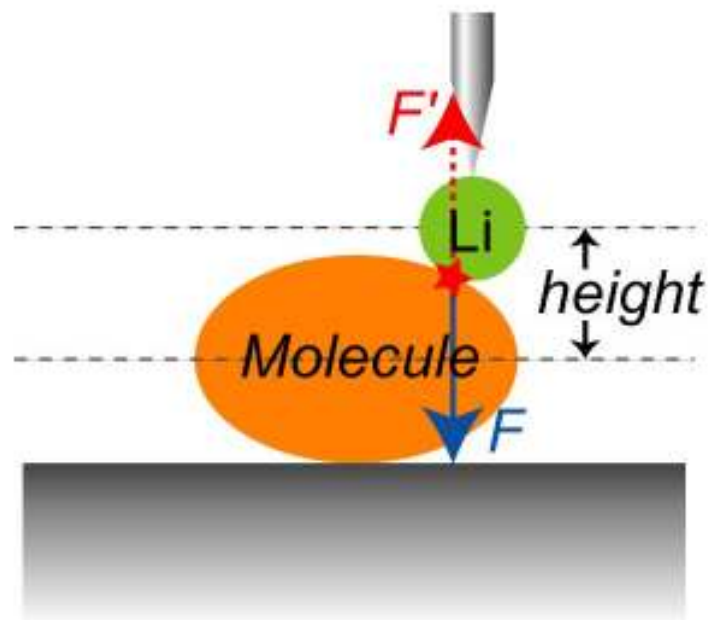
Interaction Potential for C_6H_6 / He^*



分子にatomを接触させて、
形をみることはできないか？

Topographic Mapping of Molecular Surface

via constant force balance



1. 化学とポテンシャル曲面
2. 化学結合ができる仕組み
3. 分子内ポテンシャルと分子振動
4. 分子間ポテンシャル
5. 原子と分子のポテンシャル

Next → 13:10 から 6. 化学反応とポテンシャル