

圖 2-4 (a)傳統直線型單階段式加速區(b)Wiley-McLaren 式直線型兩階段加速區飛行時間質譜儀簡圖(c)Mamyrin 提出的反射式飛行時間質譜儀簡圖，1 是離子束焦點、2 到 4 是到反射器前的自由飛行區、5 是經由反射器反射的自由飛行區及 6 是偵測器。

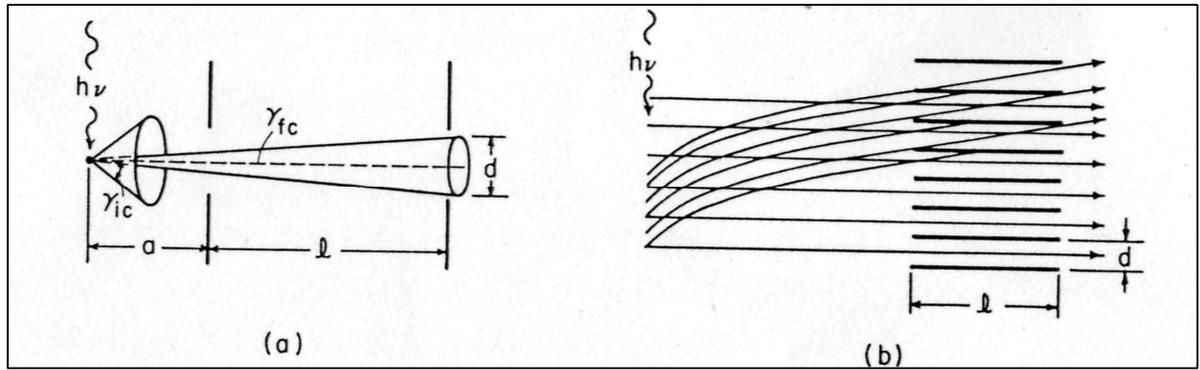


圖 2-5 兩種門檻光電子能量分析儀(a)理想的點游離源(b)較大面積的游離源之電子束的角動量分布， γ_{fc} 為電子在到達偵測器前的角動量分佈。



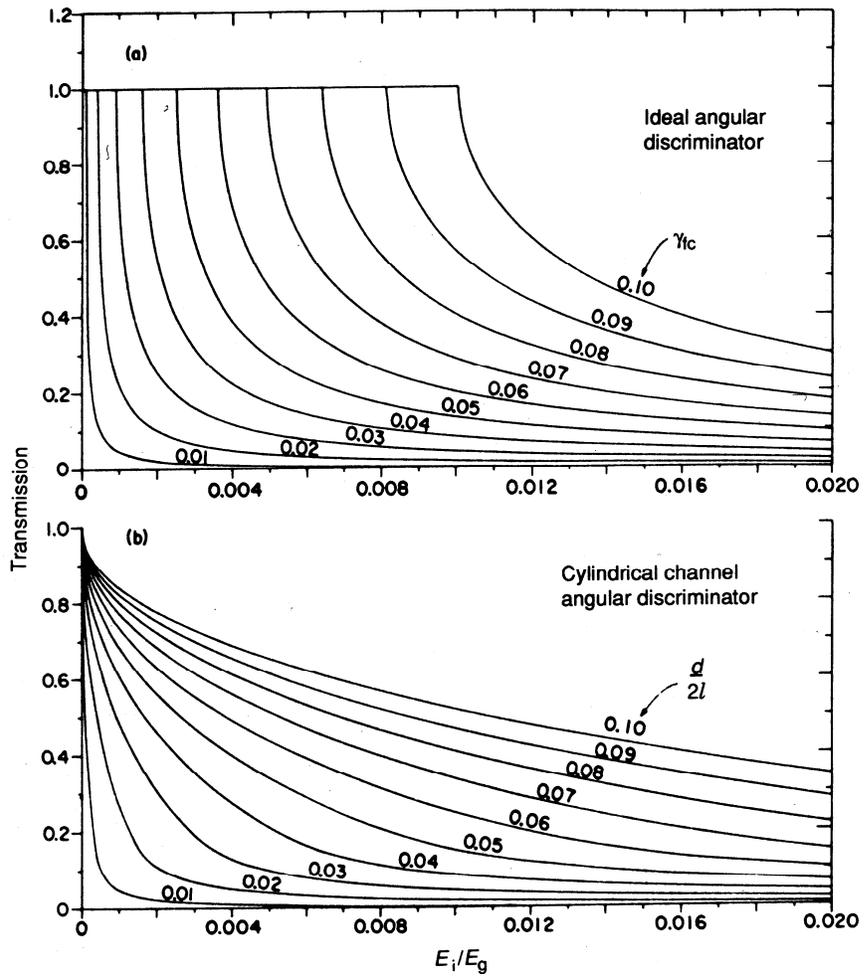


圖 2-6 光電子被吸引往小孔洞的收集率與初始動能的關係：(a)符合點游離源的電子收集率(b)符合較大面積游離源的電子收集率， E_i 為電子的初始動能， E_0 為電子經電場加速後所具有的動能，各相對的門檻電子能量分析儀如圖 2-5。

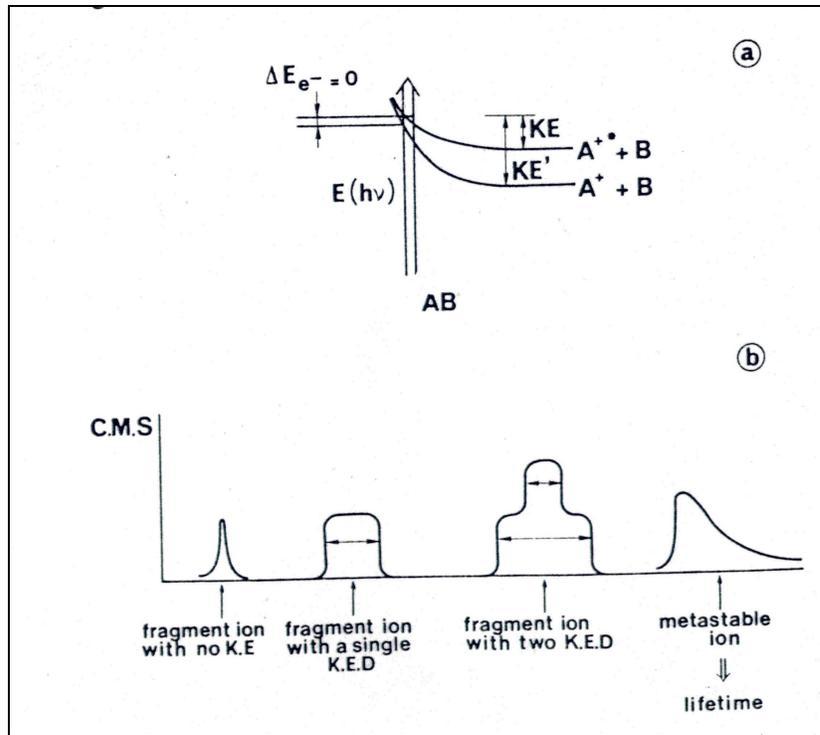


圖 2-7 (a)經光游離後的 AB^+ 進行兩種途徑解離，所釋放動能和解離產物間的示意圖(b)各樣的同現質譜譜線形狀所代表的離子釋放的平均動能。

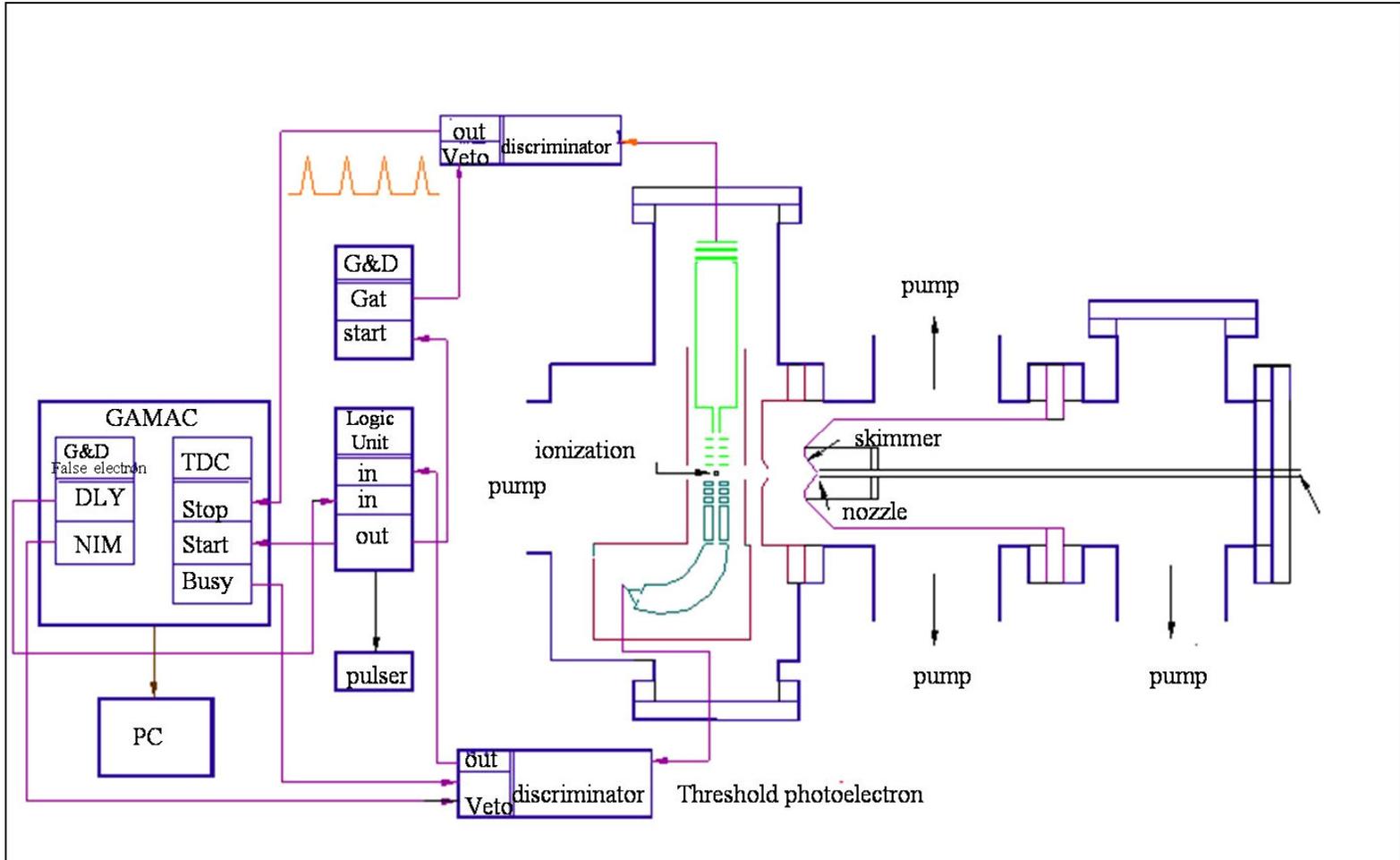


圖 2-8 實驗系統空間分布概圖。

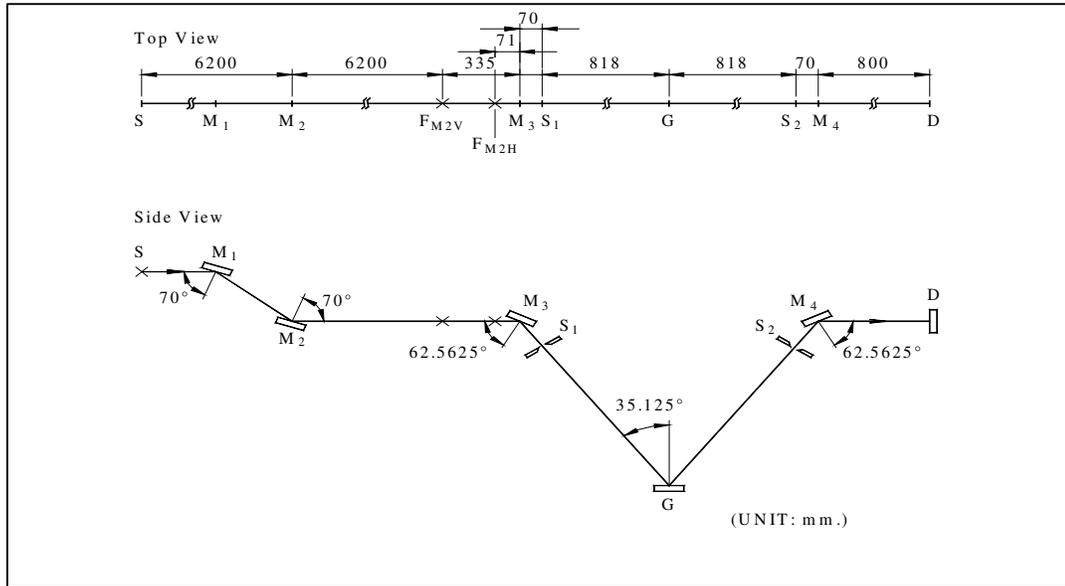


圖 2-9 國家同步輻射 04 號 SEYA 光束線光學元件配置圖。

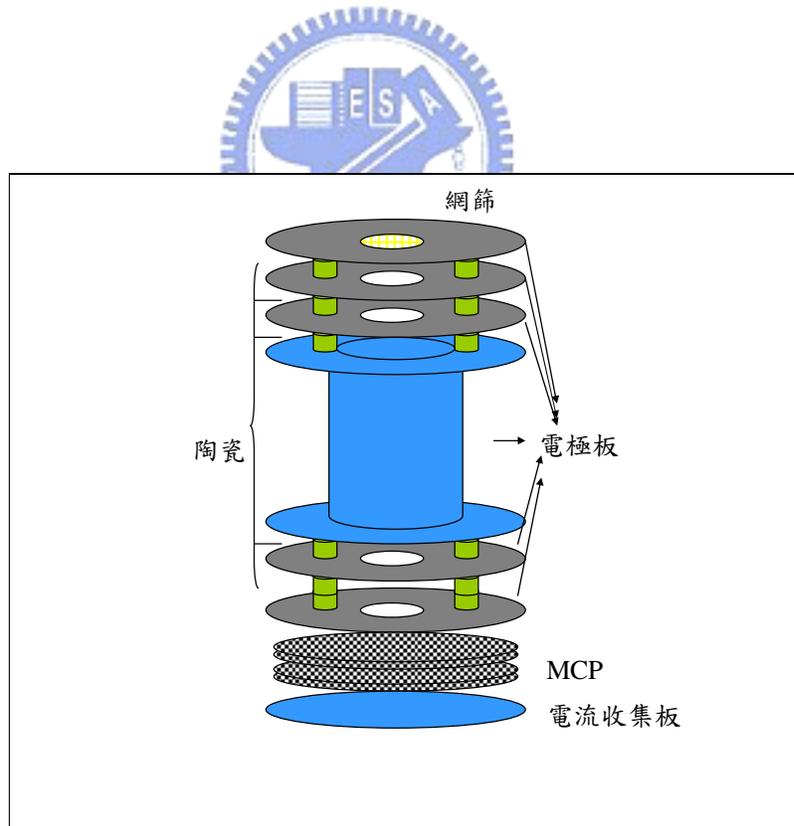


圖 2-10 自製門檻光電子能量分析儀結構圖。

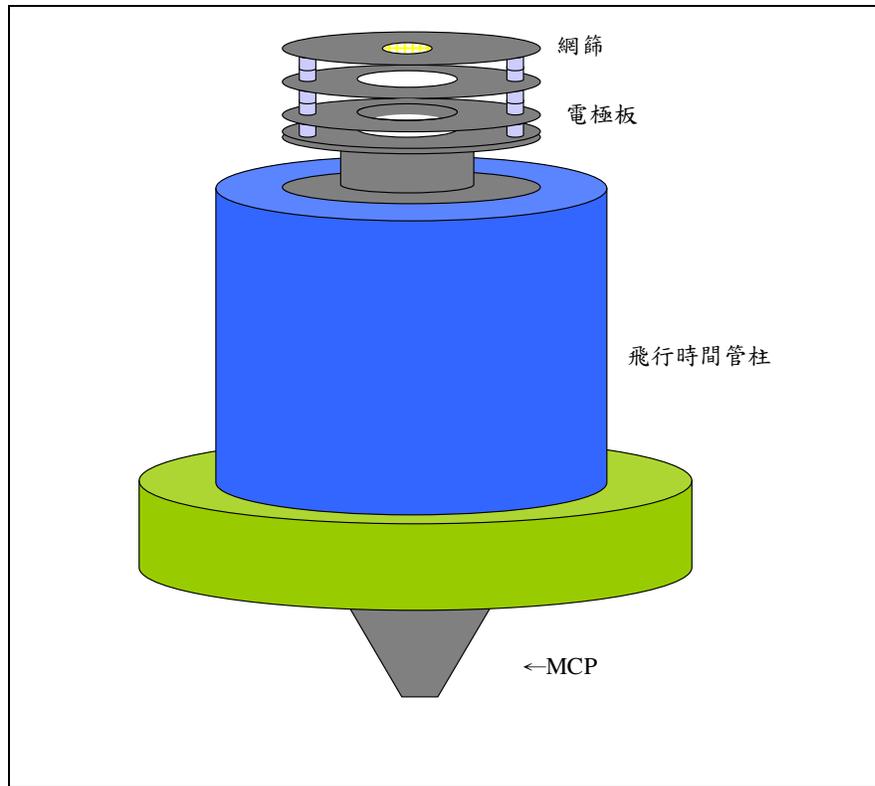


圖 2-11 自製離子飛行時間質譜儀構造圖。



表 2-1 G3 與 G3B3 的計算步驟。

	G3	G3B3
Geometry	1 MP2(full)/6-31G(d)	B3LYP/6-31G(d)
Single-point energies	2 MP4/6-31G(d)	MP4/6-31G(d)
	3 MP4/6-31G+(d)	MP4/6-31G+(d)
	4 MP4/6-31G(2df,p)	MP4/6-31G(2df,p)
	5 QCISD(T)/6-31G(d)	QCISD(T)/6-31G(d)
	6 MP2(Full)/G3large	MP2(Full)/G3large
	Spin-orbit correction ^a	7 Atomic species
Higher-level correction ^b	8 Molecules	Molecules
	A = 6.386	A = 6.760
	B = 2.997	B = 3.233
	Atoms	Atoms
	C = 6.219	C = 6.786
	D = 1.185	D = 1.269
Zero-point energy	9 HF/6-31G(d)	B3LYP/6-31G(d)
	Scaling factor 0.8929	Scaling factor 0.96

^a Spin-orbit correction 為文獻實驗值[27]。

^b 對於分子的 HLC 為 $-An_{\beta} - B(n_{\alpha} - n_{\beta})$ ，對於原子的 HLC 為 $-Cn_{\beta} - D(n_{\alpha} - n_{\beta})$ ，其中的 n_{α} 和 n_{β} 各為 α 和 β 電子在外層軌域的個數，A 和 C 為配對電子在外層軌域的校正參數，B 和 D 為非配對電子在外層軌域的校正參數。