

1P084

マイクロ波分光による骨格ねじれ振動第2励起状態の

エチルメチルエーテルの研究

(富山大・理*, 金沢大**)○村田景悟*, 小林かおり*, 常川省三*, 大橋信喜美**

【序】 エチルメチルエーテルは二つのメチル基の内部回転を有する飽和有機分子であり、W51e2¹で確認された星間分子である。その構造を図1に示す。エチルメチルエーテルには酸素に結合したメチル基(OCH₃基)による内部回転と炭素に結合したメチル基(CCH₃基)による

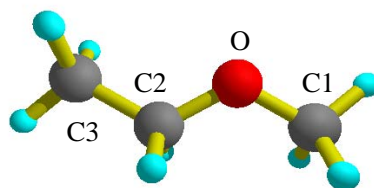


図1 *trans*-エチルメチルエーテルの構造

る内部回転があり、それぞれ振動数は248cm⁻¹と278cm⁻¹である。これら2つの内部回転によって回転スペクトルは最大5本に分裂する。さらに炭素(C2)と酸素間の結合に骨格ねじれ振動(115cm⁻¹)を有している。骨格ねじれ振動状態の励起は内部回転の励起を伴わないため、分裂パターンへの影響は小さい。これらのねじれ振動の振動数は小さいため、室温でも振動励起状態に分子が十分に分布しているため、そのスペクトルは複雑である。これまでに基底状態²、および骨格ねじれ振

動³、OCH₃ねじれ振動、CCH₃ねじれ振動がそれぞれ励起された状態のマイクロ波スペクトルの帰属をつけることができた。本研究では基底状態より227 cm⁻¹高いエネルギーにある酸素と炭素間の骨

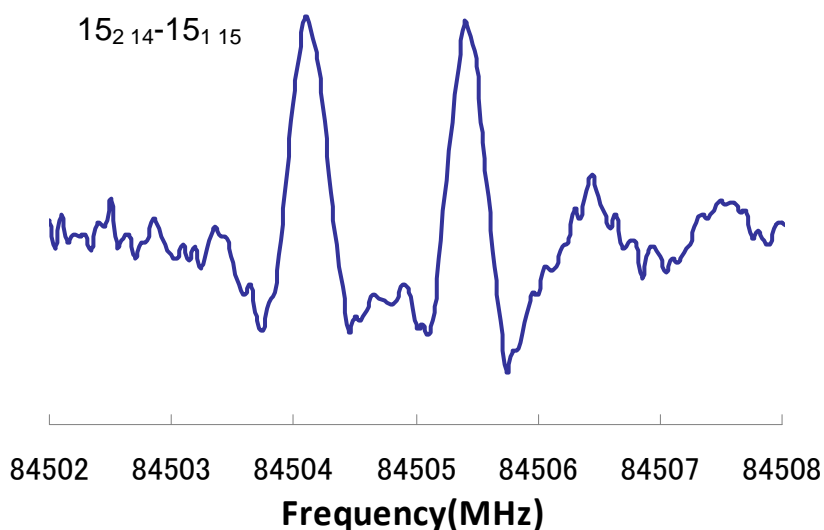


図2 骨格ねじれ振動第2励起状態のエチルメチルエーテルのスペクトル

格ねじれ振動励起状態の回転スペクトルの帰属・解析について報告する。

【実験】 骨格ねじれ振動励起状態のエチルメチルエーテルのスペクトル測定を容易にするため、ドライアイスで吸収セルを冷却し、スペクトル強度を高めて測定を行った。測定は周波数変調方式の分光計を用いた。測定されたスペクトルの1例を図2に示す。

【結果・解析】 基底状態のスペクトルと骨格ねじれ振動第1励起状態の分子定数から骨格ねじれ振動第2励起状態の分子定数を予想した。内部回転による分裂はほぼ同じと考え、強度が基底状態のおよそ1/3の吸収線を探した。200 GHz以下の周波数で $J = 68$, $K = 4 - 3$ まで帰属を拡張することができた。

スペクトル解析は、これまで解析してきた様々のねじれ振動励起状態の場合と同様に2つのねじれ振動（メチル基内部回転）による分裂の可能性を考慮したtunneling matrix formalism (TMF)⁴に基づいて作られたプログラムを用いて行った。用いたハミルトニアンはWatson's S-reduced form である。骨格ねじれ振動第2励起状態では骨格ねじれ振動第1励起状態と同様に、基底状態の高い J, K で見られたような二つのメチル基内部回転による4本の分裂は今のところ観測されておらず、O-CH₃ 内部回転による2本に分裂しているのみではあるが、将来、各振動励起状態に対する分子定数を比較することを考慮して、このTMFによるアプローチが用いられた。これまでに骨格ねじれ振動第2励起状態の729本の遷移を解析し、rms = 65 kHz となった。内部回転の分裂に異常が見られたが、この原因については骨格ねじれ振動第1励起状態の場合と同様に、やはり、骨格ねじれ振動—O-CH₃ 内部回転—C-CH₃ 内部回転相互作用によるものと考えている。

参考文献

1. G. W. Fuchs, U. Fuchs, T. F. Giesen, and F. Wyrowski, *Astron & Astrophys.*, **444**, 521 (2005).
2. S. Tsunekawa, Y. Kinai, Y. Kondo, H. Odashima, K. Takagi, *Molecules*, **8**, 103 (2003).
3. K. Kobayashi, T. Matsui, N. Mori, S. Tsunekawa, and N. Ohashi, *J. Mol. Spectrosc. In press*.
4. J. T. Hougen, *J. Mol. Spectrosc.* **89**, 296 (1981). TMF を使用した解析の一例としては M. Fujitake, Y. Kubo, N. Ohashi, *J. Mol. Spectrosc.* **236**, 97 (2006).