

マイクロ波分光によるギ酸メチル同位体($\text{HCOO}^{13}\text{CH}_3$)の研究

(富山大院・理工¹, 金沢大²) ○山内 孝修¹, 舘 遥風¹, 小林 かおり¹,
常川 省三¹, 桑野 恵², 藤竹 正晴², 大橋 信喜美², 林 直人¹, 樋口 弘行¹

【序】ギ酸メチル分子は CH_3 基の水素以外を同一平面に持つ非対称コマ分子である。図 1 にその構造を示す。分子全体の回転の他、 CH_3 基と HCOO 基が互いにねじれるように振動するねじれ振動(内部回転)を持つ。またこのねじれ振動は分子全体の回転とエネルギー的に同程度の大きさとなるために振動回転相互作用が大きい。メチル基のねじれ振動は三回対称ポテンシャルをもつため、スペクトルが A 対称種と E 対称種に分裂し、複雑になる。

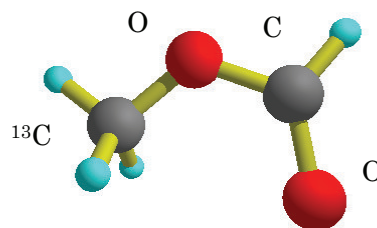


図 1 ギ酸メチルの構造

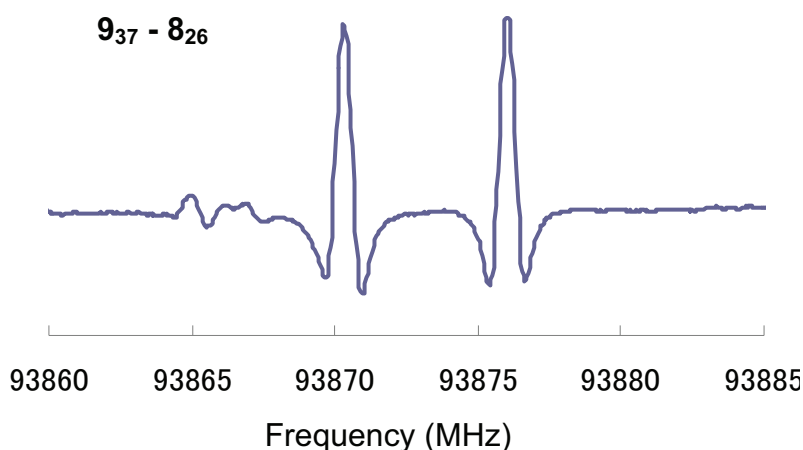
ギ酸メチルはねじれ振動などのエネルギーの低い振動モードをいくつか持っており、通常の周波数変調方式マイクロ波分光計を用いた室温での測定の場合、振動励起状態にも多くの分子が分布している。そのため、非常に多くのスペクトル線が観測され帰属・解析が困難になっている。

一方、ギ酸メチルは星間分子としてもよく知られており、500 本以上の線が Orion-KL など観測されている。今後、新しい電波望遠鏡の建設に伴い、望遠鏡の測定感度が向上し、現在観測されていない弱い遷移が多数観測されることが期待される。その中で、非常に多くの遷移の観測されているギ酸メチルの同位体種は良い候補である。本研究ではメチル基(CH_3)の炭素が ^{13}C に置換された $\text{HCOO}^{13}\text{CH}_3$ のマイクロ波分光による研究を行った。

この同位体($\text{HCOO}^{13}\text{CH}_3$)について過去に行われた研究報告は 1959 年の R.F.Curl¹ による 8 – 30 GHz において振動基底状態のスペクトル線を 14 本帰属のみであったが、つい最近、M. Carvajal 等² によってマイクロ波分光による研究が同様になされると同時に Orion-KL での同定が報告された。しかしながら内部回転を有する分子の場合には測定範囲外への外挿による周波数予想は不十分である場合が多く、また、本研究とは測定周波数帯も異なっている部分がある。

【実験】実験は富山大学の周波数変調方式マイクロ波分光計と金沢大学の超音速ノズルジェ

ットフーリエ変換型マイクロ波分光計を用いて行った。周波数変調方式マイクロ波分光計によって測定されたスペクトルの一例を図 2 に示す。



【結果・解析】富山大学周波数変調方式マイクロ波分光計による実験では 75.0 - 93.8 GHz の領域で測定し、

約 3000 本のスペクトルを観測した。また金沢大学フーリエ変換型マイクロ波分光計による実験では 11.0 - 26.0 GHz の領域で測定し、20 本のスペクトルを観測した。

解析には J. T. Hougen の提唱した Tunneling Matrix Formulation (TMF)³ に基づいてつくられたプログラムを用いた。Curl の報告にある測定周波数を用いて再解析を行い、遷移周波数を予測した。これに基づいて帰属を行い、帰属本数を増やした。Curl の報告したデータは一部を除いてフーリエ変換型マイクロ波分光計による再測定を行ったため、本研究のフィッティングには用いていない。これまでに 67 本の遷移を解析し、rms = 58.5 kHz となった。今後、110 GHz までの測定と解析を予定しているため、当日は新しいデータも含めた結果を報告する予定である。

参考文献

1. R. F. Curl, *J. Chem. Phys.* **30**, 1529 (1959)
2. M. Carvajal, L. Margulès, B. Tercero, K. Demyk, I. Kleiner, J. C. Guillemin, V. Lattanzi, A. Walters, J. Demaison, G. Wlodarczak, T. R. Huet, H. Møllendal, V. V. Ilyushin, and J. Cernicharo, *Astron. & Astrophys.* **500**, 1109 (2009).
3. 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).