

マイクロ波分光によるギ酸メチルねじれ振動

第2励起状態 E 対称種の研究

(富山大学¹、金沢大学²) 小林かおり¹、酒井祐輔¹、
高村一徳¹、常川省三¹、大橋信喜美²

Microwave Spectroscopic Study on Methyl Formate E - Sublevel in The Second Torsional Excited State

(Univ. Toyama¹、Kanazawa Univ.²) Kaori Kobayashi¹, Yusuke Sakai¹,
Kazunori Takamura¹, Shozo Tsunekawa¹, and Nobukimi Ohashi²

【序】 ギ酸メチルは1975年に Sgr B2 において初めて発見された。¹ その後の観測において、星間空間において確認されたラインが最も多い分子である。ギ酸メチルはメチル基の内部回転(ねじれ振動)を有するため、A と E の2つの対称種に分裂する。さらに、このねじれ振動数を含めた低振動数のモードを複数有するために、室温でも励起状態への分布が充分に見られる。これにより、スペクトルは非常に複雑になる。実際、200 GHz 以下の周波数帯での観測データのうち、これまでに帰属がつけられているのは15%程度である。

最近、基底状態だけでなく、このねじれ振動第2励起状態にあるギ酸メチルがオリオンに存在することが確認された。² 実験室分光法による帰属の拡張が進めば、さらに未同定線を明らかにすることが期待される。本研究ではこのギ酸メチルのねじれ振動第2励起状態の帰属と解析について特に E 対称種について進めることができたので報告する。

【実験およびデータ】 富山大学の周波数変調マイクロ波分光計を用いて 215-231.6 GHz の測定を新しく行った。解析にはこれらの新しいデータと従来の 200 GHz 以下の測定データの両方を用いた。基底状態、ねじれ振動第1励起状態、第2励起状態が確認できる図を図1に示す。ねじれ振動第1、第2励起状態のエネルギーは量子化学計算によるとそれぞれ 134.3 cm^{-1} (E 対称種)、 134.8 cm^{-1} (A 対称種)、 242.8 cm^{-1} (A 対称種)、 248.9 cm^{-1} (E 対称種)である。図中では基底状態は A, E 対称種の分裂幅が小さいため、1本のように見えるが、励起状態では分裂が大きくなることと強度の減少が確認できる。

【結果・解析】 既にねじれ振動第2励起状態の A 対称種については $K=14$ まで帰属が進められていたが、E 対称種については $K=3$ までと限られていた。我々は以下のよ

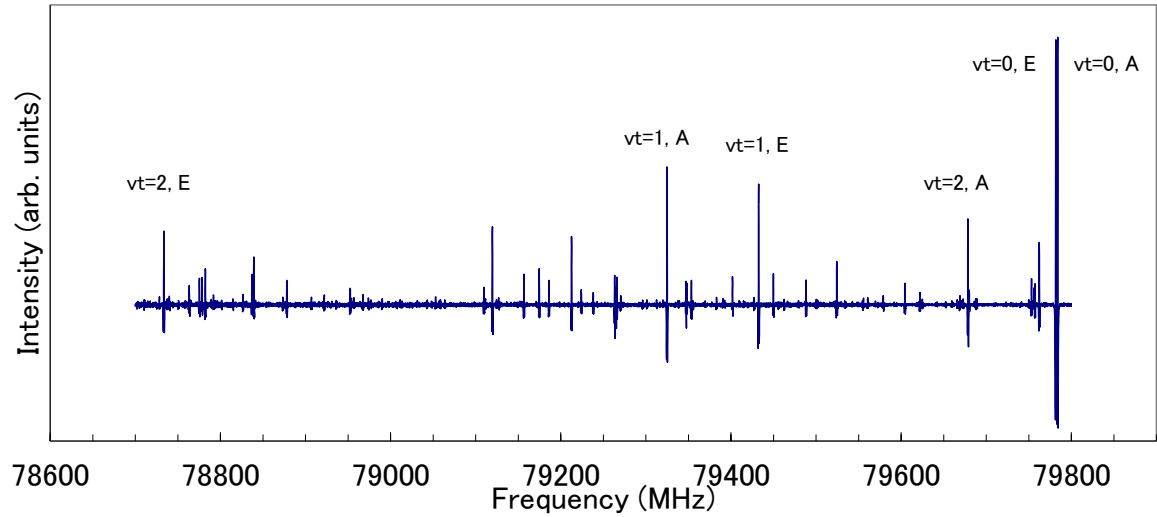


図1 ギ酸メチルのマイクロ波スペクトル

うな pseudo-PAM Hamiltonian を用いた $K=3$ までの解析結果と強度の比較から $K=4$ 以上のスペクトルの解析に成功した。

$$\begin{aligned}
H = & AJ_z^2 + BJ_x^2 + CJ_y^2 - \Delta_J \mathbf{J}^4 - \Delta_{JK} \mathbf{J}^2 J_z^2 - \Delta_K J_z^4 \\
& - 2\delta_J \mathbf{J}^2 (J_x^2 - J_y^2) - \delta_K \{ J_z^2 (J_x^2 - J_y^2) + (J_x^2 - J_y^2) J_z^2 \} \\
& + Fp^2 + \frac{1}{2} V_3 (1 - \cos 3\theta) \\
& + (q + q_J \mathbf{J}^2 + q_{JJ} \mathbf{J}^4 + q_{JK} \mathbf{J}^2 J_z^2 + q_{JKK} \mathbf{J}^2 J_z^4) J_z p \\
& + (r J_x + r_J J_x \mathbf{J}^2 + r_K [J_x J_z^2 + J_z^2 J_x] + r_{JK} \mathbf{J}^2 [J_x J_z^2 + J_z^2 J_x]) p \\
& + (r_{f3} [J_x (J_x^2 - J_y^2) + (J_x^2 - J_y^2) J_x]) p \\
& + A_c J_z^2 (1 - \cos 3\theta) + B_c J_x^2 (1 - \cos 3\theta) + C_c J_y^2 (1 - \cos 3\theta) \\
& - \Delta_{JKc} \mathbf{J}^2 J_z^2 (1 - \cos 3\theta) - \Delta_{Kc} J_z^4 (1 - \cos 3\theta)
\end{aligned}$$

231 GHz 以下の周波数で $K=11$ まで帰属を拡張することができた。

参考文献

- 1 R. D. Brown, J. G. Crofts, P. D. Godfrey, F. F. Gardner, B. J. Robinson, and J. B. Whiteoak, *Astrophys. J.*, **197**, L29 (1975).
- 2 S. Takano, Y. Sakai, S. Kakimoto, M. Sasaki, and K. Kobayashi, *Publications of Astronomical Society of Japan*, **64**, 89 (2012).
- 3 M. L. Senent, M. Villa, F. J. Meléndez, and R. Domínguez-Gómez, *Astrophys. J.*, **627**, 567 (2005).