

1A14

## アミノアセトニトリル重水素置換体 (NHDCH<sub>2</sub>CN, ND<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN)

### のサブミリ波分光

(東邦大院・理<sup>1</sup>, 富山大・理<sup>2</sup>) ○元木 勇太<sup>1</sup>, 尾関 博之<sup>1</sup>, 小林かおり<sup>2</sup>

## Sub-millimeter Wave Spectroscopy of Deuterated-Aminoacetonitrile (Toho Univ.<sup>1</sup>, Univ. Toyama<sup>2</sup>) Yuta Motoki<sup>1</sup>, Hiroyuki Ozeki<sup>1</sup>, Kaori Kobayashi<sup>2</sup>

### 【序】

星間空間内における気相アミノ酸の探索は 1970 年代から行われているが未だ確証は得られていない。しかし、このような生体関連分子の星間空間における生成機構を議論するためには、その前駆体となり得る分子についても観測の必要性がある。そのため我々は現在、生体関連分子前駆体の実験室サブミリ波分光を行っている。

アミノ酸の中で最も単純な分子構造を持つグリシン (NH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COOH) は、実験室でアミノ酸を生成する際よく用いられるストレッカー反応によると、NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>CO, H<sub>2</sub>O, HCN といった星間分子として馴染みのある分子から生成される。この反応によると、アミノアセトニトリル (NH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN) は加水分解によりグリシンを生成する前駆体である<sup>1</sup>。またこの分子は、2008 年に Belloche らにより銀河中心方向 Sgr B2(N) から検出されており、今後星間空間内でストレッカー反応によりグリシンが生成される証拠になり得ると考えられる<sup>2</sup>。また、ALMA が本格稼働することにより今後新たにアミノアセトニトリルの重水素置換体のスペクトルも得られる可能性がある。

アミノアセトニトリルの純回転線スペクトルは MacDonald & Tyler (1972)<sup>3</sup>, Pickett (1973)<sup>4</sup> の 30GHz 帯の測定から始まった。その後の Bogey et al. (1990)<sup>5</sup> により 300GHz 帯までの測定が行われ、高次の遠心力項までを含む分子定数が決定された。しかし、その重水素置換体 (NHDCH<sub>2</sub>CN, ND<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN) の測定は MacDonald & Tyler (1972), Pickett (1973) によるもののみで、遠心力項はほとんど決まっていない。

本グループでは、すでにアミノアセトニトリル通常種の純回転線スペクトルを THz 帯まで拡張して測定しており ALMA の全バンドに対応できる分子定数を決定している。今回は重水素置換体の測定結果を報告する。

### 【実験】

測定は東邦大学の光源周波数変調型サブミリ波分光計を用いた。測定周波数範囲は、366–500GHz である。装置については 2008 年度の本討論会で紹介済みであるので詳細は省略する<sup>6</sup>。市販の AAN と重水をモル比でおよそ 1:1, 1:5 で混合した溶液を作成し、AAN 重水素置換体を生成した。前者を NHDCH<sub>2</sub>CN、後者を ND<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN の測定に使用した。測定はガラスセル内に試料ガスを 2~4Pa 程度の圧力で導入し行った。

## 【結果】

現在までの結果を以下の表 1 に示す。解析には SP-FIT を用い、Hamiltonian は Watson の S-reduced Hamiltonian を使用した。また、8 次までの遠心力歪定数で分子定数を決定した。

表 1 NHDCH<sub>2</sub>CN, ND<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN の分子定数 \* (1σ)

constant (MHz)	NHDCH <sub>2</sub> CN	ND <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CN	NH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CN
A	27580.7933( 91)	25377.6696( 77)	30246.48843( 95)
B	4631.37403( 90)	4505.13608( 83)	4761.062560(130)
C	4188.66698( 95)	4082.17118( 87)	4310.748586(132)
D <sub>J</sub> × 10 <sup>3</sup>	3.108206(312)	3.087035(280)	3.066858(108)
D <sub>JK</sub>	-0.0471619( 44)	-0.0401089( 37)	-0.05529522(128)
D <sub>K</sub>	0.547302(196)	0.424216(139)	0.7140742(110)
d <sub>1</sub> × 10 <sup>3</sup>	-0.691005(293)	-0.672882(266)	-0.673531( 33)
d <sub>2</sub> × 10 <sup>3</sup>	-0.028097( 66)	-0.017741( 54)	-0.0299364( 81)
H <sub>J</sub> × 10 <sup>9</sup>	9.598( 41)	9.455( 35)	9.5302(308)
H <sub>JK</sub> × 10 <sup>6</sup>	-0.09747( 72)	-0.08387( 63)	-0.12422( 52)
H <sub>KJ</sub> × 10 <sup>6</sup>	-2.0975(214)	-1.4062(176)	-2.7163( 82)
H <sub>K</sub> × 10 <sup>3</sup>	0.03486(138)	0.02286( 80)	0.053231( 48)
h <sub>1</sub> × 10 <sup>9</sup>	4.034(121)	4.023(106)	3.8713(127)
h <sub>2</sub> × 10 <sup>9</sup>	0.4418(158)	0.3533(124)	0.4731( 61)
h <sub>3</sub> × 10 <sup>9</sup>	0.04330(303)	0.02088(254)	0.05284(188)
L <sub>J</sub> × 10 <sup>12</sup>			-0.03548(292)
L <sub>JJK</sub> × 10 <sup>12</sup>			0.492( 68)
L <sub>JK</sub> × 10 <sup>12</sup>			-4.65(133)
L <sub>KKJ</sub> × 10 <sup>9</sup>			0.1892(157)
L <sub>K</sub> × 10 <sup>9</sup>			-4.412( 59)
l <sub>1</sub> × 10 <sup>12</sup>	-0.0219(158)	-0.0367(134)	-0.02082(154)
l <sub>2</sub> × 10 <sup>15</sup>			-4.80( 91)
l <sub>3</sub> × 10 <sup>15</sup>			-0.73( 38)
rms	0.926	0.880	0.978

<sup>1</sup> Ugliengo, P., Rimola, A., & Sodupe, M. 2011, *Rend. Fis. Acc. Lincei*, **22**, 137

<sup>2</sup> Belloche, A. et al. 2008, *A&A*, **482**, 179

<sup>3</sup> MacDonald, J. N. & Tyler, J. K. 1972, *J. C. S. Chem. Comm*, 995

<sup>4</sup> Pickett, H. M. 1973, *J. Mol. Spectrosc.* **46**, 335

<sup>5</sup> Bogey, M., Dubus, H. & Guillemin, J. C. 1980, *J. Mol. Spectrosc.* **143**, 180

<sup>6</sup> 尾関他 第二回分子科学討論会 (福岡) **2P086**