

ギ酸メチル同位体 $\text{HCOO}^{13}\text{CH}_3$ の
ねじれ振動第二励起状態のマイクロ波分光

(富山大学 院理工) ○桑原拓郎, 小林かおり

The Microwave Spectroscopy of $\text{HCOO}^{13}\text{CH}_3$
in the Second Torsional Excited State

(Univ. of Toyama) ○Takuro. Kuwahara, Kaori. Kobayashi

【序】

ギ酸メチルは 1975 年に Sgr B2 においてギ酸メチルが初めて発見された 1 星間分子である。Orion KL や Sgr B2 等の領域で多くのスペクトル線が観測されている。この分子は CH_3 基の水素以外を同一平面に持つ prolate 型の非対称こま分子であり、星間空間に存在する分子の中では比較的複雑な構造をしている。またメチル基の内部回転により A と E の二つの対称種に分裂し、内部回転による低い振動励起状態にも分布するため、多くのスペクトル線をもつ。実験室マイクロ波分光によってその励起状態や同位体の回転スペクトルの研究が行われている。中でも ^{13}C のギ酸メチル同位体はノーマルのギ酸メチルに対して宇宙空間での存在量は約 1/50 と多く、マイクロ波分光データに基づいて Orion KL のような星間空間でもねじれ第一励起状態まで同定されている。^{2,3} ギ酸メチル同位体のより高い励起状態も近年の電波望遠鏡の感度向上により観測される可能性がある。ギ酸メチル同位体($\text{HCOO}^{13}\text{CH}_3$)のねじれ振動第二励起状態に関する研究報告はなく、今回我々が第二励起状態のスペクトルを初めて同定することに成功したので報告する。

【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、ノーマル種との類推も考慮して、ねじれ振動第二励起状態の遷移周波数の予測される範囲の測定を行った。これまでに 147-262 GHz の範囲で、主に第二励起状態の期待される周波数帯で測定を行った。

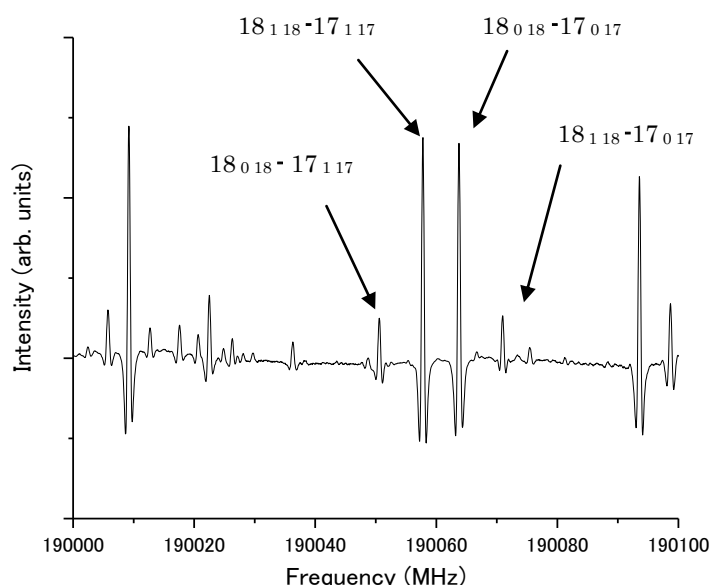


図 1 ; ねじれ振動第二励起状態のスペクトルの例
対称種はすべて A である

図 1 はねじれ振動第二励起状態のスペクトルの例である。量子数 J の高い領域では図のような量子数の遷移の組み合わせのスペクトルは 4 本組のパターンとして表れている事が知られている。 J, Kc の回転量子数が変わっても同様のパターンが現れる。ノーマル種の大極子モーメントの a 軸成分と、 b 軸成分はそれぞれ 1.63D、0.68D である。⁴ メチル基の炭素が ^{13}C に置換されても大極子モーメントの成分は大きく変化はしないことが期待される。図の中央の 2 本は a -type の強いスペクトルで、その脇に b -type の 2 本の弱いスペクトルが見られる。これらを手掛かりに帰属することができた。

【結果・解析】

解析には新たに測定したデータに加え、富山大学でこれまでに蓄積したギ酸メチル同位体のデータを用いた。現在のところ、以下のハミルトニアンを用いて A 対称種と E 対称種の個別のフィットを行い、分子定数を改善し、帰属を拡張、さらに実験のようなサイクルを継続しているところである。ハミルトニアンは以下の実効的なものを利用した。右辺の最後の三項は E 対称種にのみ使用している。

$$\begin{aligned}
 H = & AJ_z^2 + BJ_x^2 + CJ_y^2 - \Delta_J \mathbf{J}^4 - \Delta_{JK} \mathbf{J}^2 J_z^2 - \Delta_K J_z^4 \\
 & - 2\delta_J \mathbf{J}^2 (J_x^2 - J_y^2) - \delta_K \{ J_z^2 (J_x^2 - J_y^2) + (J_x^2 - J_y^2) J_z^2 \} \\
 & + qJ_z + rJ_x + sJ_y
 \end{aligned}$$

現在までにねじれ振動第二励起状態のスペクトルを A 対称種は約 20 本、E 対称種は約 30 本帰属することができた。

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. 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, *Astronom. Astrophys.*, **500**, 1109 (2009).
3. I. Haykal, M. Carvajal, B. Tercero, I. Kleiner, A. López, J. Cernicharo, R. A. Motiyenko, T. R. Huet, J. C. Guillemin, and L. Margulès, *Astronom. Astrophys.*, **568**, A58 (2014)
4. R. F. Curl Jr, *J. Chem. Phys.* **30**, 1529 (1959)