

NHDラジカルのテラヘルツスペクトル

¹東邦大院理, ²富山大院理工 (理学)
○尾関博之¹, 谷岡美咲², 小林かおり²

Terahertz spectrum of NHD radical

○Hiroyuki Ozeki¹, Misaki Tanioka¹, Kaori Kobayashi²
¹Department of Environmental Science, Toho University, Japan
²Department of Physics, Toyama University, Japan

【Abstract】 Pure rotational spectra of mono-deuterated amidogen radical, NHD, have been measured in the frequency region between 1100 and 1600 GHz. Fine and hyperfine structure due to electron spin, nitrogen, hydrogen and deuterium nuclear spin were partially resolved. About 100 spectral line frequencies of 12 rotational transitions have been subjected to the analysis combined with the data previously obtained by microwave spectroscopy. Higher-order centrifugal distortion coefficients are newly determined.

【序】 Amidogen radical NH₂ は窒素の水素付加あるいはアンモニアの分解過程における中間体として知られている。基本的な3原子分子ということもあり、これまでに数多くの分光学的研究が行われてきた。NH₂ は星間分子としても知られており、その重水素置換体の正確な静止周波数を決定することは重要である。NH₂ の一重水素置換体である NHD の高分解能分光としては、マイクロ波-可視二重共鳴法[1]、および遠赤外フーリエ変換分光法[2]による測定がある。小林ら[3]はマイクロ波分光法を用いて 500GHz 以下の low *J* の回転遷移を 30kHz の周波数精度で測定し、窒素核、水素核、重水素核の超微細構造定数を含む分子定数を精密に決定した。しかし、測定した回転遷移の数が十分ではないため、遠心力定数をすべて決定するところまではいかなかった。以上を踏まえ、我々は主要な回転遷移が集中するテラヘルツ帯において、マイクロ波分光法に準じる周波数精度で NHD ラジカルの純回転スペクトルを測定した。

【実験】

スペクトル測定は東邦大学に設置している周波数変調型テラヘルツ分光計を用いて行った。NHD ラジカルは NH₃, D₂, Ar の混合気体を直流グロー放電することにより生成した。これまでに 1100-1600 GHz の周波数範囲で 12 本の純回転遷移を観測した。測定したスペクトル線の例を図 1 に示す。Amidogen radical は磁場の印加により Zeeman 分裂する。地磁気の影響を低減するために、測定にあたって吸収セルの周囲 3 方向に Helmholtz coil を設置した。

【解析】

スペクトルの解析は以下の Hamiltonian を用いて行った。

$$H = H_{ROT} + H_{SR} + H_{hf}$$

回転エネルギーは Watson の A-reduced Hamiltonian を用い、6 次までの遠心力項を考慮した。超微細相互作用 H_{hf} としては、Fermi 接触項、磁気双極子-双極子相互作用、および核四重極子相互作用を考慮した。回転、不対電子、N 核、H 核、および D 核の角運動量の結合様式を、

$$J = N + S, F_1 = J + I_N, F_2 = F_1 + I_H, F = F_2 + I_D$$

とし、量子数の帰属を行った。

【結果・考察】

1100~1600GHz の周波数範囲で、これまでに 12 本の回転遷移を測定し、およそ 100 本のスペクトル線周波数を得た。図 1 にスペクトルの一例を示す。スティックダイアグラムで示したのは、超微細分裂した個々のスペクトル線の分布である。これらの情報をもとに、適当な圧力幅および変調幅を仮定してスペクトルを再構成すると、実測のデータをよく説明することができる。本実験を始めた段階では、テラヘルツ帯のスペクトル線予想周波数は実測値と最大で数十 MHz ずれていたが、図にも示す通り 100kHz 前後の周波数精度で説明することができるようになった。

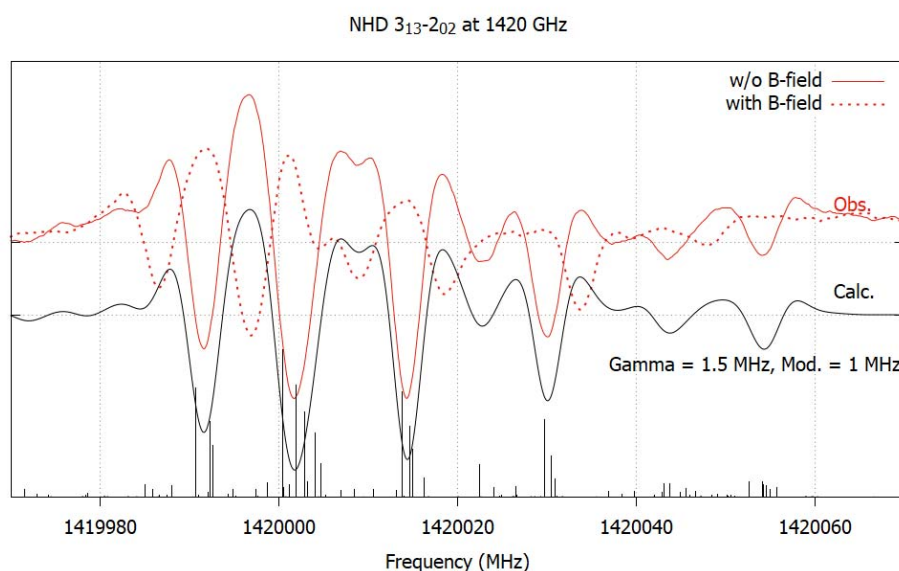


Fig. 1. Partially hyperfine-resolved spectra of NHD radical observed at 1420 GHz.

Table 1. Molecular constants of NHD so far obtained for rotational part.

	Present study	Kobayashi et al.[3]
A	602873.8275(100)	602873.269(53)
B	243145.839(188)	243150.415(86)
C	169880.437(189)	169875.877(79)
Δ_N	9.29300(89)	9.2833(28)
Δ_{NK}	30.7775(118)	30.303(39)
Δ_K	250.8873(219)	250.825(30)
δ_N	3.07447(112)	3.04088(35)
δ_K	44.141(112)	46.854(41)
Φ_N	0.001027(48)	
Φ_{NK}	-0.04401(252)	-0.0901(33)
Φ_{KN}	0.1360(89)	
Φ_K	0.5477(64)	0.59213(76)
ϕ_{NK}	0.03103(99)	
ϕ_K	-0.4164(165)	

(1 σ)

(3 σ)

【参考文献】

- [1] T. C. Steimle, J. M. Brown, and R. F. Curl, Jr., *J. Chem. Phys.* **73**, 2552(1980).
 [2] I. Morino and K. Kawaguchi, *J. Mol. Spectrosc.* **182**, 428 (1997).
 [3] K. Kobayashi et al. *J. Chem. Phys.* **107**, 9289 (1997).