

オキサゾールのマイクロ波分光

富山大院理工(理学)

○小林 かおり, 青木 茄津未, 宇野 将太, 常川 省三

Microwave Spectroscopy of Oxazole

○Kaori Kobayashi, Natsumi Aoki, Shota Uno, Shozo Tsunekawa

Department of Physics, University of Toyama, Japan

【Abstract】 Oxazole (C_3H_3NO) is a five membered ring molecule with two hetero-atoms, nitrogen and oxygen. Previous microwave spectroscopic studies were carried out below 40 GHz and it is desirable to have information for future interstellar detection. In this study, pure rotational spectroscopy of oxazole was carried out by using conventional microwave spectroscopy and chirp-pulse Fourier-transform spectroscopy with a waveguide cell. Up to 340 GHz was observed at room temperature. Assignment was straightforward based on the previous molecular constants and detailed analysis using Watson's S -reduced Hamiltonian will be reported.

【序】 アミノ酸は 5 員環分子であるヒダントインの加水分解によって生成させることができる。また骨格中に 5 員環分子を持つアミノ酸も存在する。これらのことから 5 員環分子に着目して研究を行っている。オキサゾール (C_3H_3NO) は 1 位に酸素、3 位に窒素のヘテロ原子を含む 5 員環芳香族化合物の一つであり、構造異性体には 2 位に窒素を有するイソオキサゾールがある。Fig. 1.にオキサゾールの構造を示す。

Mackrodt らによってシュタルク変調型マイクロ波分光計による測定を用いて $J = 1-0, 2-1$ の測定が行われ、双極子モーメントと核四重極子相互作用を含む分子定数が決定された。[1] Kumar らによる 40 GHz 以下の帯域での 2 重共鳴変調マイクロ波分光およびシュタルク変調型マイクロ波分光計による測定によって、同位体置換体を含めた測定が 40 GHz 以下の周波数領域で行われ構造および分子定数が決定された。[2, 3] $600-1400\text{ cm}^{-1}$ の帯域での高分解能赤外分光によって基底状態及び 10 個の振動励起状態の分子定数が求められた。

[4] 将来的な星間分子としての観測にはより広い帯域での静止周波数の測定が望

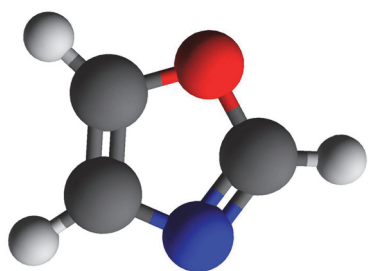


Fig. 1. Structure of oxazole

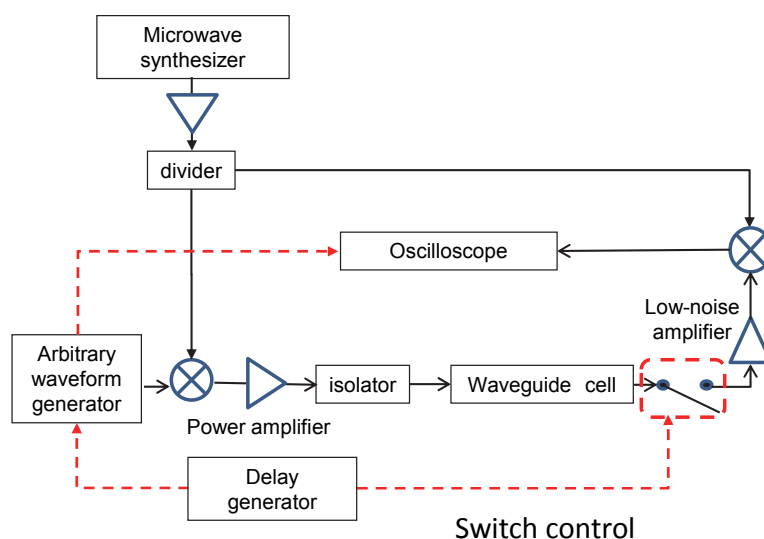


Fig. 2. Experimental setup of CP-FTMW spectrometer

まれる。本研究では 340 GHz 以下の帯域におけるオキサゾールのマイクロ波分光を行った。

【実験】 マイクロ波分光の実験はチャープパルスフーリエ変換型(CP-FTMW)[5]および周波数変調型マイクロ波分光計[6]を用いて行った。Fig. 2.に概略図を示すチャープパルスフーリエ変換型マイクロ波分光計はチャープパルスの帯域が最大 240 MHz で中心周波数 8-18 GHz 帯の測定が可能である。セルには導波管を用いており圧力は約 10 mTorr で測定を行った。圧力が低く変調幅も持たないため、中心周波数の決定精度は 30 kHz 程度である。周波数変調型のマイクロ波分光計では 40-340 GHz 帯を圧力 20-50 mTorr で測定した。精度は約 50 kHz である。いずれも実験は室温である。

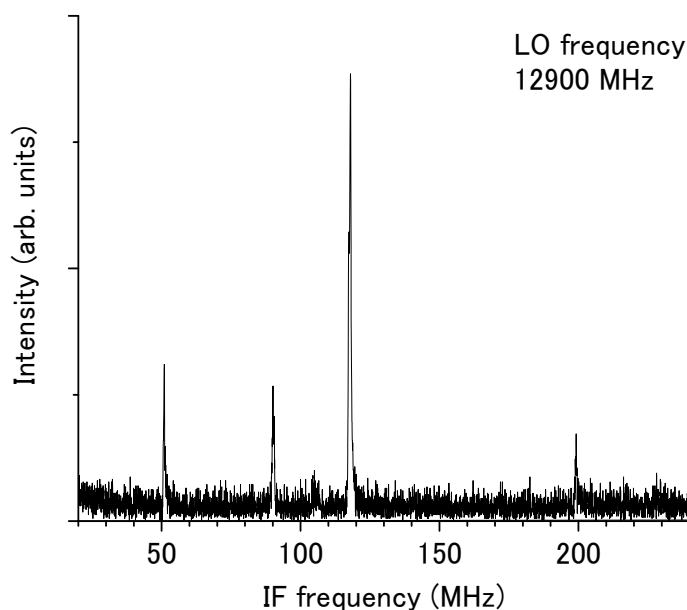


Fig. 3. A sample spectrum obtained by using CP-FTMW spectrometer

【結果・解析】

Fig. 3.に CP-FTMW によるオキサゾールの測定例を示す。ダブルサイドバンドとしているために、ローカル周波数の両側に現れる 20-240 MHz の帯域を表すものになる。帰属は先行研究による分子定数を用いた周波数予測に基づいた。双極子モーメントも大きく、予想された約 10 GHz おきに現れる強い Q-branch も測定され、帰属は容易であった。Watson's S-reduced Hamiltonian を用いて解析を行っており、当日は詳細を報告する予定である。

【参考文献】

- [1] W. C. Mackrodt, A. Wardley, P. A. Curnuck, N. L. Owen, and J. Sheridan, *Chem. Commun. (London)*, **0**, 692(1966).
- [2] A. Kumar, J. Sheridan, and O. L. Stiefvater, *Z. Naturforsch.* **33a**, 145-152 (1978).
- [3] A. Kumar, J. Sheridan, and O. L. Stiefvater, *Z. Naturforsch.* **33a**, 549-558 (1978).
- [4] F. Hegelund, R. Wugt Larsen, M.H. Palmer, *J. Mol. Spectroscop.* **241**, 26-44 (2007).
- [5] 小林かおり、*分光研究* **66**(1), 23-33 (2017).
- [6] K. Kobayashi, K. Takamura, Y. Sakai, S. Tsunekawa, H. Odashima, and N. Ohashi, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **205**, 9 (2013).