

1P074

MgN と CaN の分光定数の理論的予測

(東大院工¹・北大院理²) 石井啓策¹・武次徹也²・山下晃一¹

「序」 シリコンとマグネシウムはほぼ同じ宇宙存在度を持つ。しかしシリコンを含む星間分子としては SiC, SiN, SiO, SiS, SiC₂, SiC₃, SiC₄, SiCN, SiH₄ が見ついているのに対し、マグネシウムを含む星間分子は MgNC と MgCN の二つだけである。SiC と SiN との類似性を考えると、MgC と MgN が次のマグネシウムを含む星間分子の候補である。両分子ともどの周波数領域においても実験的研究は行われていない。一方、理論計算は MgC に対しては数例の報告があるものの、MgN に対しては一例のみしかない。またマグネシウムと同じアルカリ土類金属であるカルシウムを含む星間分子はまだ見つからない。MgNC との類似性から CaNC がその第一候補として考えられ、純回転スペクトルも報告されたが、残念ながら宇宙では見つからなかった。最近 CaC の純回転スペクトルも報告されたが、こちらも星間スペクトルは報告されていない。以上をふまえると CaN が次のカルシウムを含む星間分子の候補である。CaN に対しては実験的研究は行われていない。理論計算は一例あるが四重項のみを扱っており二重項は考慮されていない。本研究では新規アルカリ土類金属含有星間分子の発見を目指して、MgN と CaN に対し高精度 *ab initio* 分子軌道計算を行い、それらの分光定数を予測し実験室及び宇宙での同定の一助とする。

「計算」 方法論としては CASSCF-MR-SDCI(+Q)法を用いる。CASSCF 計算においてはアクティブスペースに全てのバレンス軌道とバレンス電子を取り入れた。MR-SDCI(+Q)計算においては Mg-L 殻と Ca-M 殻コアの電子相関を取り入れた。基底関数としては MgN の場合 Mg に TZ3P+f、N に TZ2P+f を用い、CaN の場合には Ca に Sadlej の pVTZ にパウシュリッヒャーの大きな分極関数を加え、N に対しては aug-cc-pVTZ を用いた。MgN の ⁴Σ⁻, ²Π と CaN の ²Π, ⁴Σ, ²Σ, ⁴Π 電子状態のポテンシャルエネルギー曲線を計算し、スプライン関数にフィットして、それから核のシュレディンガー方程式を解き振動回転固有状態を求めて分光定数を計算した。

「結果」 MgN の基底電子状態は ⁴Σ と計算され第一励起電子状態は ²Π で、そのエネルギー差は約 2300cm⁻¹ である。計算された分光定数は ⁴Σ が $B_0 = 13.259\text{GHz}$, $D_0 = 38.507 \times 10^{-6}\text{GHz}$, $\omega_e = 493.4\text{cm}^{-1}$, $\omega_e x_e = 10.3\text{cm}^{-1}$, $\mu_e = 2.61\text{D}$, ²Π が $B_0 = 15.620\text{GHz}$, $D_0 = 38.939 \times 10^{-6}\text{GHz}$, $\omega_e = 660.9\text{cm}^{-1}$, $\omega_e x_e = 2.91\text{cm}^{-1}$, $\mu_e = 4.08\text{D}$ となった。CaN に対しては、基底電子状態は ²Π, 第一・第二・第三電子励

起状態は $^4\Sigma^-$, $^2\Sigma^-$, $^4\Pi$ となった。しかし $^2\Pi$ と $^4\Sigma^-$ のエネルギー差は 493.4cm^{-1} と非常に小さく順番が入れ替わる可能性も否定できない。分光学定数の理論値は $^2\Pi$ は $B_0 = 10.731\text{GHz}$, $D_0 = 19.406\text{ GHz}$, $\omega_e = 541.3\text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e = 4.46\text{ cm}^{-1}$, $\mu_e = 2.86\text{ cm}^{-1}$, $^4\Sigma^-$ は $B_0 = 9.3373\text{ GHz}$, $D_0 = 18.460 \times 10^{-6}\text{GHz}$, $\omega_e = 448.8\text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e = 4.24\text{ cm}^{-1}$, $\mu_e = 3.42\text{D}$ となった。

これらの分光学定数の予測値が MgN と CaN の実験室及び宇宙での同定の一助になることを切望する。

「参考文献」 Ishii, K., and Taketsugu, T. AB INITIO PREDICTION OF SPECTROSCOPIC CONSTANTS OF MgN IN X $^4\Sigma^-$ and a $^2\Pi$ ELECTRONIC STATES: ANOTHER POTENTIAL CANDIDATE FOR A NEW Mg-BEARING INTERSTELLAR MOLECULE, *Astrophys. J.* **626**, L33-L35 (2005).