

星間分子イオン HD_2O^+ のサブミリ波スペクトル：

反転分裂幅および電波天文分光用ライン周波数

(福井大学遠赤外領域開発研究センター) ○古屋 岳, 齋藤修二

【序】

近年、分子雲コアの進化に伴う重水素置換分子種の濃縮が注目され、様々な重水素化分子の天文観測と平行して実験室分光が行なわれている。 H_3O^+ イオンは星間空間において水の前駆体として注目されている分子イオンであり、その重水素化物は分子雲コアの収縮過程の解明に資する有効なプローブになると提案されている¹。我々は、これら分子の星間探査に必要な基礎データを提供することを主な目的に、 H_3O^+ の重水素置換体のマイクロ波分光を行っている²。昨年の当討論会では1重水素置換体である H_2DO^+ について報告した³。一方、2置換体である HD_2O^+ については、最近、高分解能赤外分光⁴の結果が報告されている。また、同分子イオンのマイクロ波分光の初期的な結果については本年度の日本物理学会年会にて報告した⁵。本会ではその後の研究結果について報告する。

【周波数予測】

最近、Dongら⁴はパルスジェット・高分解能赤外分光法により HD_2O^+ の反転 ν_3 振動バンドの分光を行い、振動基底、励起両状態の分子定数および反転分裂幅を報告している。しかし、振動基底反対称状態の C' 回転定数は、 r_z 構造に基づいて予測された回転定数と異なり、振動基底対称状態の C'' 回転定数よりも小さい。振動基底対称状態の回転定数はこの状態についてのコンビネーション・デファレンスの解析に基づいているので、信頼できると判断し、そのまま予想値として用いた。一方、反対称状態の回転定数は、 r_z 構造に基づいて予測された両状態の回転定数の比と対称状態の赤外分光で得られた回転定数から導いた。振動基底状態の反転分裂幅は $27.0318(72) \text{ cm}^{-1}$ と赤外分光の解析結果として報告されているが、上に記した理由で、その誤差は、約10倍、2000 MHz程度と予測した。これらの予想分子定数に基づいて遷移周波数、その予想範囲を見積もった。800 GHzまでの周波数領域で測定可能な HD_2O^+ の遷移は主に対称、反対称状態を結ぶc型遷移のスペクトル線である。それらは、P、R枝については、 $0_{00}^- - 1_{10}^+$ を含む、 $K_a=3-2$ 、 $J=3$ までの8本、Q枝については、 $1_{01}^- - 1_{11}^+$ を含む、 $K_a=3-4$ 、 $J=9$ までの6本の計14本である。

【実験および結果】

実験には福井大学の高感度・高分解能サブミリ波分光装置を使用した。装置の詳細については省略する。水、重水の混合ガスをフリースペース・セルに流し、ホローカソード電極を用いた直流グロー放電により HD_2O^+ を生成した。 HD_2O^+ のスペクトル強度をモニターし、実

験条件を最適化した結果、ガス圧はそれぞれ H₂O: 1.6Pa, D₂O: 1.6Pa、セルの温度は 263 K 前後であった。実験装置の安定性、発振出力、スペクトル線帰属の容易さなどを考慮し、まず、600 GHz 帯で K 型二重項分裂を示す K_a=3-2、J=3-2 の 2 本のスペクトル線を探索した。探索結果ならびに 3₃₀⁺-2₂₀⁻、3₃₁⁺-2₂₁⁻ 遷移を含む 600 GHz 帯の赤外分光で得られた分子定数に基づいた予想スペクトル、および r_z 構造に基づいた分子定数からの予想スペクトルを図 1 に示す。スペクトル線の印加磁場に対する振る舞いおよびその他の試験に基づき、4 本スペクトル線を候補とした。最初、強度とスペクトル線の間隔から、赤外分光の結果からの予測に近いパターンに対応するスペクトル線を帰属した。3₃₁⁺-2₂₁⁻ のスペクトル線と仮に帰属された測定例を図 2 に示す。この最初のスペクトル線の帰属に基づいて、P、R 枝のスペクトル線を拾い、8 本帰属した段階で、K_a=2-1、K_a=3-2 の Q 枝を拾い上げることができず、3₁₂⁺-3₂₂⁺ の帰属が間違っていたとの結論に至った。現在、3₁₂⁺-3₂₂⁺ のスペクトル線の帰属を 633.8 GHz のラインから 627.2 GHz のラインに変更し、0₀₀⁻-1₁₀⁺ を含む 2 本のスペクトル線の帰属を終えている。これら 5 本のスペクトル線の予備的な解析に基づく、振動基底状態の反転分裂幅は、赤外分光で得られた値より 1.7-2.6 GHz 小さい。なお HD₂O⁺ の天文観測でもっとも重要なスペクトル線は、パラ種については 0₀₀⁻-1₁₀⁺ 遷移であり、380.5 GHz に見出されている。一方オルト種で最も重要な遷移は 1₀₁⁻-1₁₁⁺ であるが、現在 720 GHz 帯で探索中である。

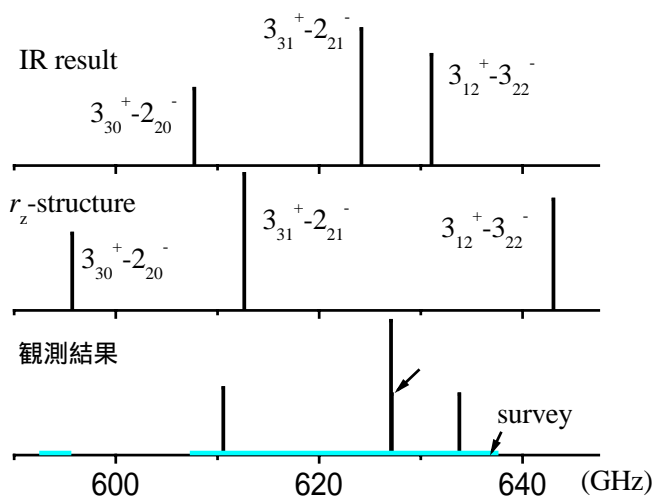


図 1 600 GHz 帯のスペクトルパターン

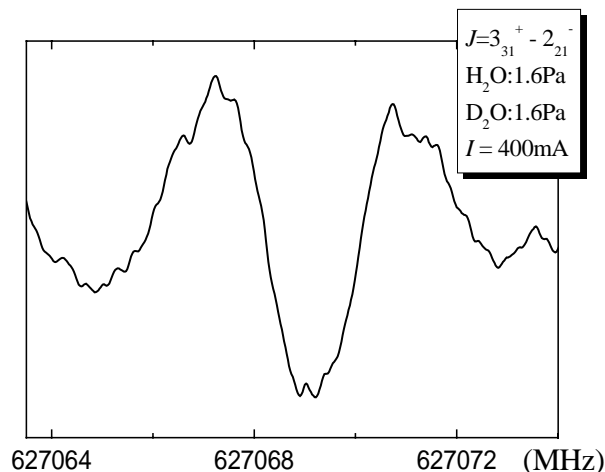


図 2 スペクトルの測定例

参考文献

- ¹Caselli, P. Space Sci., **50**,113 (2002)
- ²Araki, M. et al. Mol. Phys., **97**, 177 (1999)
- ³古屋、齋藤、荒木、分子構造総合討論会、1C04 (2005)
- ⁴F. Dong et al. J. Chem. P. **122**, 224301 (2005)
- ⁵古屋、齋藤、日本物理学会、第 61 回年次大会、29pTB-2 (2006)