

MgNC $\tilde{A}^2\Pi$ および $\tilde{X}^2\Sigma^+$ 状態の回転振電構造

The ro-vibronic structure of the MgNC $\tilde{A}^2\Pi$ and $\tilde{X}^2\Sigma^+$ states

福島 勝、石渡 孝

広島市立大学 情報科学部

Masaru Fukushima and Takashi Ishiwata

Faculty of Information Sciences, Hiroshima City University,

We have generated MgNC in supersonic free jet expansions, and measured the laser induced fluorescence excitation spectra of the $\tilde{A}^2\Pi - \tilde{X}^2\Sigma^+$ transition. In the spectra, we find some new features consisting of the ν_2 bending vibronic structure. From rotational analysis of the vibronic bands we have obtained new information on the ro-vibronic structure of the $\tilde{A}^2\Pi$ state of MgNC. The assignments of the ν_2 bending vibronic bands were carried out by the vibrational analyses of the dispersed fluorescence spectra obtained by the excitation of the ν_2 bending vibronic bands. On the basis of vibrational structure of the dispersed spectra, the vibronic structure of the $\tilde{X}^2\Sigma^+$ state of MgNC have been analysed.

【序】含マグネシウム化合物は、有機合成における金属触媒としての重要性、あるいは、未知の星間分子としての可能性などの観点から、広く興味が持たれている化合物である。最近、我々は、この金属触媒としての化学的性質の起源の解明、および、星間空間のスペクトルサーチに必要な分光学的情報の取得を目的として、含マグネシウム化合物のジェット分光を行っている。本発表では、MgNC の $\tilde{A}^2\Pi$ および $\tilde{X}^2\Sigma^+$ 状態の振電構造に関して、新たな情報が得られたので、その結果について報告する。

【実験】MgNC はレーザー蒸発法により生じる Ar プラズマ中で生成させた。Mg 原子はレーザー蒸発に用いたターゲットから、また、CN はプラズマ中での CH_3CN の分解によって供給した。レーザー誘起蛍光 (Laser Induced Fluorescence; LIF) は、ノズルオリフィスの下流、およそ 40 mm で観測した。高分解能 LIF 励起スペクトルの測定は、エネルギー分解能約 0.03 cm^{-1} のレーザー光源を用いて測定した。ケイ光分散スペクトルは、焦点距離 50 cm の分光器を用いて測定した。

【結果】MgNC の最低電子遷移、 $\tilde{A}^2\Pi - \tilde{X}^2\Sigma^+$ 、の LIF ケイ光励起スペクトルは、Wright と Miller により 0_0^0 、 2_0^2 、 3_0^1 の振電バンドが観測されている¹⁾(ν_1 : C-N 伸縮振動、 ν_2 : Mg-N-C 変角振動、 ν_3 : Mg-NC 伸縮振動)。我々が彼らと同じエネルギー領域のスペクトルを新たに測定したところ、新たな振電バンドが観測された。まず、これらの振電バンドのケイ光分散スペクトルを測定し、そのスペクトルの振動構造から振電バンドの帰属を試みた。この結果、新たに観測された振電バンドのほとんどが ν_2 変角振動モードのプロGRESSIONに帰属されることが明らかとなった。次に、 $\tilde{A}^2\Pi$ 状態の Renner-Teller 構造を調べるために、これら変角振電バンドの回転構造を測定した。 ν_2 変角振動プロGRESSIONのうちで、回転構造が分解できたスペクトルは、 $2_0^1(\kappa)$ 、 $2_0^2(\mu)$ 、 $2_0^2(\kappa)$ 、 $2_0^6(\kappa)$ の4つである。このうち、最もエネルギーの高い $2_0^6(\kappa)$ の回転構造は、複雑で現時点では解析できていない。この複雑な構造は、異性化反応との関連もあり興味が持たれる。 $2_0^6(\kappa)$ 以外は、それぞれ単独に、比較的簡単に解析できた。現在、Renner-Teller パラメータを含め、3つの回転構造の総合的解析を進めている。一方、ケイ光分散スペクトルの振動構造から、 $\tilde{X}^2\Sigma^+$ 状態の変角振動構造に関する情報も得られた。発表では、この振動構造と異性化反応の関連についても議論する。

¹⁾ R. R. Wright and T. A. Miller, J. Mol. Spectrosc. 194 (1999) 219.