FeCO および FeNO ラジカルの振動励起状態のミリ波分光

池田誠規、中島基、坂元愛、林雅人、原田賢介、田中桂一
九州大学大学院 理学研究院

Millimeter-wave spectroscopy of the FeCO and FeNO radicals in the vibrational excited states.

Seiki Ikeda, Motoki Nakashima, Ai Sakamoto, Masato Hayashi, Kensuk338.62V.66(1.2(6-7.2(i4-7.2(i16-7.c(a)33.4(h)-2.9(

1.725 Å と決定した (図 3。CO 結合距離を 1.159 Å に固定)。*ab initio* 計算の結果は決定した α_3 と r_e(Fe-C) とそれぞれ 0.55、0.2 %の誤差で一致する。$2\nu_2$ 状態は振電相互作用により 9 つの副準位 ($P = 0, 1, 2, 3$) に分裂する。これまでに $P = 0$ 準位の回転線を観測し、現在他の成分の測定を進めている。

［FeNO ラジカル］基底状態 $^2\Delta_i$ のスピン副準位 $\Omega = 5/2, 3/2$ の純回転遷移の測定を報告した[2]。今回は $\Omega = 5/2$ の ν_2 状態 ($P = 7/2, 3/2$)、$2\nu_2$ 状態 ($P = 9/2, 5/2, 1/2$) の純回転遷移を観測した。図 2 に得られた $2\nu_2$ 状態のスペクトルを示す。$P = 9/2, 1/2$ のシグナルは近接した周波数、$P = 5/2$ のシグナルが少し低周波数側で観測された。$2\nu_2$ 状態 ($P = 1/2$) の遷移ではパリティ分裂が観測されたが、窒素核 ($I_{\mathrm{N}} = 1$) による超微細分裂はいずれの遷移でも観測されなかった。。得た吸収線を最小自乗解析し、ν_2、$2\nu_2$ 状態の分子定数を得た。$2\nu_2$ 状態 ($P = 5/2$) の回転定数は $P = 9/2, 1/2$ の回転定数より約 1.3 MHz 小さい値となった。これは $2\nu_2$ 状態 ($P = 5/2$, 616 cm^{-1}) に近接する ν_3 状態 ($\Omega = 5/2$, 657.5 cm^{-1}) との Fermi 共鳴によるものと思われる。現在、Fermi 共鳴の解析と平衡構造の決定を目的として、ν_3 状態の回転遷移の測定を進めている。

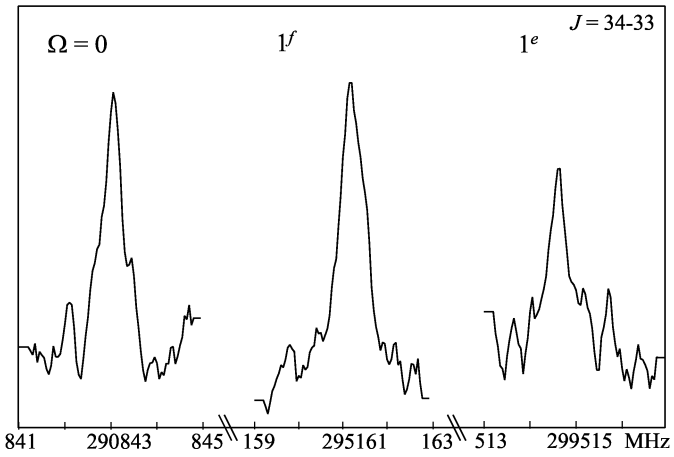

図 1：FeCO ラジカルの ν_3 状態の回転スペクトル

表 1：FeCO ラジカルの分子定数

定数		Unit
B_e	4374.405(72)	MHz
α_1	21.852(47)	MHz
α_2	−10.5073(18)	MHz
α_3	20.2051(14)	MHz

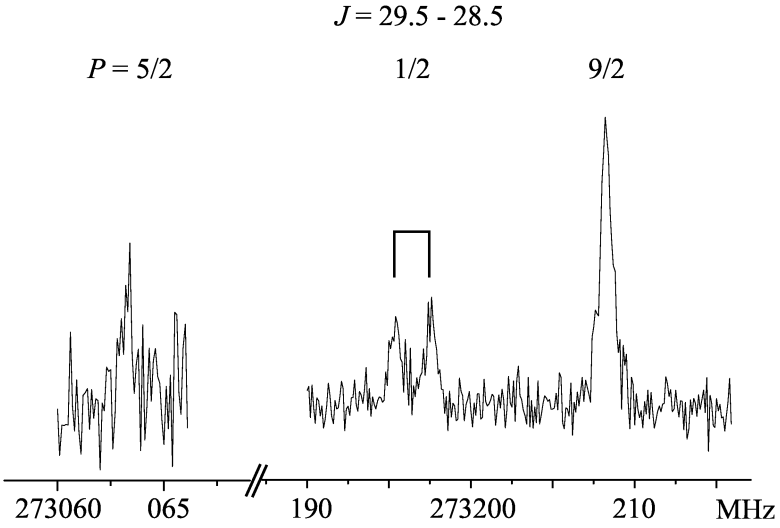

図 2：FeNO ラジカルの $2\nu_2$ 状態の回転スペクトル

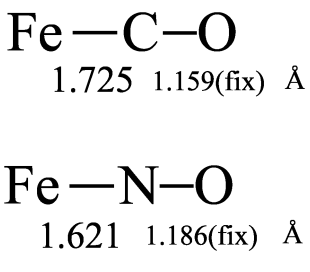

図 3：FeCO, FeNO の構造