

振動励起状態のアミノアセトニトリルのマイクロ波分光による研究

(東邦大院理^a, 富山大院理^b) ○藤田智帆^a・尾関博之^a・小林かおり^b

A STUDY OF AMINOACETONITRILE IN THE VIBRATIONAL EXCITED STATE BY MICROWAVE SPECTROSCOPY

(Toho Univ.^a, Univ. Toyama^b) Chiho Fujita^a, Hiroyuki Ozeki^a, Kaori Kobayashi^b

Aminoacetonitrile ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CN}$) is a potential precursor of the simplest amino acid, glycine in interstellar space. In 2008, Belloche et al. reanalyzed the previous millimeter-wave transitions of aminoacetonitrile, and detected it toward SgrB2(N)¹⁾. We have extended the laboratory measurement to the terahertz region and gave a good prediction including deuterated isotopologues that is valuable for the future detection.²⁾ There are three low-lying vibrational excited states, CCN bending (235 cm^{-1}), NH_2 torsion (247 cm^{-1}) and $\text{NH}_2\text{-CH}_2$ torsion (370 cm^{-1}).³⁾ We have searched for a pure rotational spectra in a vibrational excited state and found a series of transitions. Based on the molecular constants of this state, we succeeded to identify a set of transitions which are in the second excited state of the same vibrational excited state.

アミノアセトニトリル ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CN}$) は、加水分解により最も単純なアミノ酸であるグリシンを生成する。そのため星間空間におけるグリシンの前駆体候補の分子として注目されてきた。2008年にはBellocheらは、星間空間におけるアミノアセトニトリルの検出を目指すにあたり、従来のマイクロ波分光データを精査し、再解析を行ったデータに基づいて、Sgr B2で初めて検出した。¹⁾ 我々はALMAをはじめとしたテラヘルツ帯での観測に備えて、アミノアセトニトリルの純回転スペクトルを、ほぼ未測定であった b-type 遷移を含め、テラヘルツ領域まで拡張して測定を行った。さらに重水素置換体についても測定を行い、いずれも約 1 THz までの観測に十分な精度で、スペクトル線の周波数リストを与えることができた。²⁾ この一連の研究において、アミノアセトニトリルの通常種に帰属できたスペクトル線以外に、多数の未同定線を確認することができた。これらは、その強度から振動励起状態にあるアミノアセトニトリル由来のスペクトルであると示唆された。そこで本研究では、マイクロ波分光によってこれらの同定を試みた。

アミノアセトニトリルの低振動モードは、気相の赤外分光により 500 cm^{-1} 以下に 3 種類測定されており、それらはもっともエネルギーの低いものから順に CCN bending (235 cm^{-1})、 NH_2 torsion (247 cm^{-1})、そして $\text{NH}_2\text{-CH}_2$ torsion (370 cm^{-1}) と帰属されている。³⁾ 常温環境下では、これらのスペクトル線は振動基底状態の 20-40% 程度の強度で観測されることが期待される。このことを念頭に、振動基底状態の a-type 遷移の Ka 構造に特徴的に現れる近接した doublet に着目し、スペクトル探索を行った。これらの作業は東邦大学の光源周波数変調型サブミリ波分光計を用いて行った。その結果、まず振動基底状態の 40% 弱の強度で、第一振動励起状態由来と思われるスペクトル線群を 400 GHz 帯で帰属することができた。これまでに 120-450 GHz の周波数範囲で a-type 遷移を中心に 307 本のスペクトル線を測定し、それらを基に回転定数および 6 次までの遠心力歪定数を決定した。振動基底状態の回転定数との比較からこの帰属した振動励起状態は、CCN bending であると考えられる。また、振動基底状態と第一振動励起状態の回転定数を基に第二振動励起状態の回転定数を外挿したところ、ほぼ予想位置に第一振動励起状態のやはり 40% 弱の強度で a-type 遷移に帰属できるスペクトル線

を見出した。これらについても 120-450 GHz の周波数範囲でこれまでに約 230 本を測定し、回転定数および 6 次までの遠心力歪定数を決定した。測定したスペクトルの一例を図 1 に示す。

これまでの解析では、回転量子数 N が大きくなるにつれ、摂動によると思われる遷移周波数のシフトがところどころ見受けられる。この傾向は副量子数 K_a の増加とともに顕著になっていることから、ほぼ同じエネルギーをもつ、未帰属のもう一つの振動励起状態 (NH_2 torsion) との振動回転相互作用を考慮する必要があることを強く示唆している。

¹⁾ A. Belloche *et al.*, *A&A* **482**, 179 (2008).

²⁾ Y. Motoki, Y. Tsunoda, H. Ozeki and K. Kobayashi, *ApJS*, **209**, 23 (2013).

³⁾ B. Bak, E. L. Hansen, F. M. Nicolaisen, O. F. Nielsen, *Can. J. Phys.*, **53**, 2183 (1975).

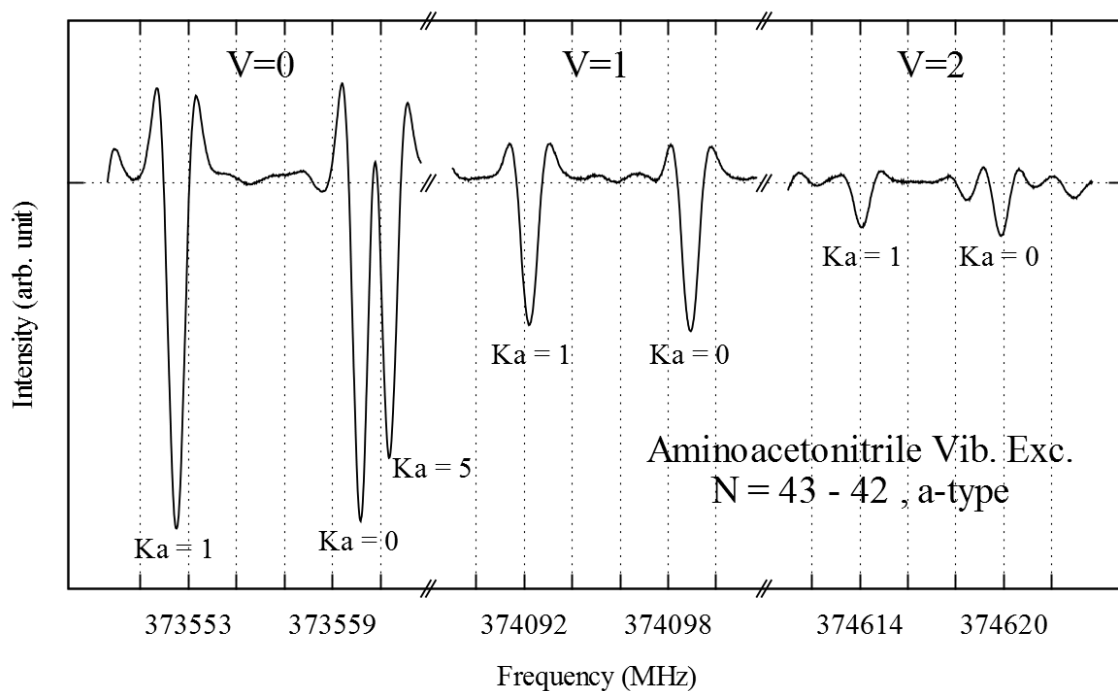


図 1 アミノアセトニトリルの振動基底状態、第一および第二振動励起状態のスペクトル