

イソオキサゾールのマイクロ波分光

(富大院理工)

○小林かおり・堀之内菜美

Microwave spectroscopy of isoxazole

(Univ. of Toyama)

KAORI KOBAYASHI, NAMI HORINOUCI

Isooxazole is one of the 5 membered rings with hetero atoms. We have observed microwave its spectra in the 40-340 GHz region by using conventional source-modulation spectrometer at the University of Toyama. About 530 lines were assigned as the rotational transitions in the ground state.

【序論】イソオキサゾール(C_3H_3NO)はヘテロ原子を含む5員環化合物の一つである。図1に分子構造を示す。イソオキサゾールは a 軸方向に1.98 D、 b 軸方向に2.12 Dの双極子モーメントを持つoblate的な分子である。[1]ヒダントインのような5員環化合物が隕石中で見つかり、5員環化合物も今後の星間分子候補と考えられる。

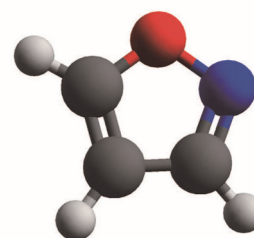


図1 イソオキサゾールの構造

これまでに35 GHz以下の周波数でマイクロ波分光の測定が行われ、同位体や振動励起状態の回転スペクトルについても帰属・解析がなされている。[1-3]しかしながら今後の電波望遠鏡による観測ではより高い周波数帯での、データが必要である。本研究ではサブミリ波帯までの精度の高い静止周波数及び分子定数の決定を目指した。

【実験】本実験では富山大学の光源変調型マイクロ波分光実験装置を使用した。シンセサイザーと適切な通倍器を組み合わせ光源とし、液体ヘリウムで冷却したInSb Detectorを用いてロックイン検出した。イソオキサゾール(Sigma-Aldrich)の圧力は0.03-0.05 Torrとした。40-340 GHz帯での測定を行った。

【結果】帰属は過去のマイクロ波分光による測定データを再解析し、予測値を作ることで進めた。約9.6 GHzおきにバンドヘッドのはっきりした強いQ-branchが現れることが予想された。一例として62 GHz帯に現れた $K_c=6-7$ のQ-branchを図2に示す。 K_a については縮重しており、超微細構造分裂も観測されていない。約530本の遷移が帰属された。これ以外にも振動励起状態のものと思われる遷移も多数観測された。解析はSPFIT/SPCAT[4]によってS-reduced Hamiltonianを用いて行っている。現在までにrms=77 kHz程度となっており、実験誤差に比べて大きいため、分子定数の改善を進めている。今後は低い周波数帯のデータを取得し、超微細構造についても解析を行う予定である。窒素と酸素の配置の異なるオキサゾールについても測定を行う予定である。

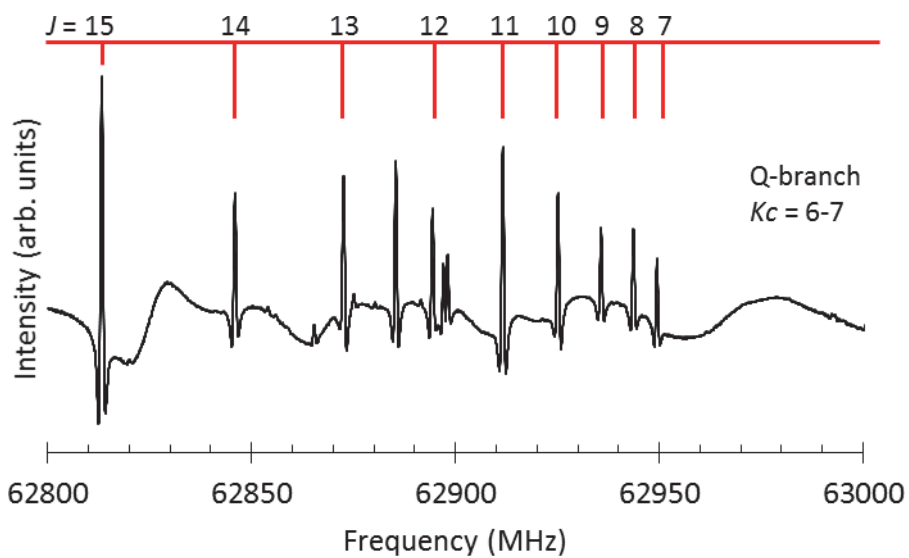


図 2 イソオキサゾールのマイクロ波スペクトル

謝辞

本研究は科学研究費補助金 基盤研究(B)「生命素材物質のルーツを宇宙に探る：天文学と分光学の融合」の補助金を受けて行われました。(課題番号 15H03646)

参考文献

- [1] W. C. Machrodt, A. Wardley, P. A. Curnuck, N. L. Owen, J. Sheridan, Chem. Comm. 19, (1966) 692.
- [2] O. L. Stiefvater, J. Chem. Phys. 63 (1975) 2560.
- [3] O. L. Stiefvater, P. Nösberger, J. Sheridan, Chem. Phys. 9, (1975) 435.
- [4] H.M. Pickett, J. Mol. Spectrosc. 148 (1991) 371.