

メタノール分子のマイクロ波ゼーマン効果 III

(富山大理^a, 国立天文台/ 総研大^b) ○高木光司郎^a・常川省三^a・小林かおり^a・
廣田朋也^b・松島房和^a

Microwave Zeeman Effect of Methanol III

(Univ.of Toyama^a,NAOJ/SOKENDAI^b) K. Takagi^a, S. Tsunekawa^a, K. Kobayashi^a,
T. Hirota^b and F. Matsushima^a

We already observed microwave Zeeman effect of methanol with uncertainties of about 5% and determined four diagonal elements of rotational g tensor including the effect of internal rotation of the methyl group [1]. In that study Zeeman effect data were analyzed in the approximation that the a -axis in the internal axes system is coincident with the symmetric axis of the CH_3 -group.

In this presentation we have examined the appropriateness of this approximation; observed data have been analyzed by introducing off-diagonal elements of the rotational g tensor, g_{ab} and g_{ba} . We have confirmed from this analysis that the approximation so far assumed is appropriate.

1. 序

現在までにメタノールの星間メーザー線のゼーマン効果が観測されている。これから星間空間での磁場を決定するには、この分子の回転遷移に対する g 因子が必要である。前回までの研究で 5% の精度でこれを決定したが、その際、内部回転座標の a 軸とメチル基の対称軸が一致している、という近似的取扱いをした [1]。その後、この近似の妥当性に疑義があるという指摘があった。より厳密な取扱いでは上述の二軸はずれているので、 g テンソルの非対角成分、 g_{ab} と g_{ba} 、を新たに導入する必要がある。本講演ではこれを考慮した解析を行い、近似の妥当性を検討する。

2. g_{ab} と g_{ba} の入った g 因子、

本講演で論ずる g 因子は次式である、

$$g_{J\tau} = \frac{1}{J(J+1)} [g_{aa}\langle P_a^2 \rangle + g_{bb}\langle P_b^2 \rangle + g_{cc}\langle P_c^2 \rangle + g_x\langle P_a p' \rangle + g_{ab}\langle P_a P_b \rangle + g_{bc}\langle P_b P_a \rangle] \quad (1)$$

P_a, P_b, P_c : 全回転角運動量、 p' : 内部回転角運動量。 [2]

今までの取り扱いでは最後の 2 項がなかった。ここで $\langle \quad \rangle$ はその状態での平均値である。ここで $\langle P_a P_b \rangle = \langle P_b P_a \rangle$ であるので $g'_{ab} = g_{ab} + g_{ba}$ として $g_{ab}\langle P_a P_b \rangle + g_{ba}\langle P_b P_a \rangle = g'_{ab}\langle P_a P_b \rangle$ と書ける。

あるねじれ振動状態 v での回転状態 (J, v, σ, K) における g 因子は

$$g_{J\tau} = b + \frac{1}{J(J+1)} [zK^2 + xK\langle p' \rangle_{v\sigma K} + c(P_b^2 - P_c^2) + y\langle P_a P_b \rangle] \quad (2)$$

と書ける、ここで $(A: \sigma = 0, E: \sigma = 1)$ で、 $b = (1/2)(g_{bb} + g_{cc})$, $z = g_{aa} - (1/2)(g_{bb} + g_{cc})$, $x = g_x$, $c = (1/2)(g_{bb} - g_{cc})$, $y = g'_{ab}$ である。

前回 [1] では、 b は $v = 0, A 1_{01} - 0_{00}$ のゼーマン分裂から直接きめ z, x, c の 3 つのパラメーターは 28 ケの遷移のデータから最小二乗法できめた。今回は新たに y を加えて、4 パラメーターの最小二乗法解析を行う。

3. 4 パラメーターによる解析

28 遷移中 i 番目の Zeeman 分裂の観測値 $M(i)$ を Eq.(2) を用いて

$$M(i) = A(i, 1)z + A(i, 2)x + A(i, 3)c + A(i, 4)y \quad (3)$$

と表す。 $A(i, 1)$, $A(i, 2)$, $A(i, 3)$ は z, x, c に関する係数で、これはすでに計算してある[1]。今回は新たに各 i に対して $\langle P_a P_b \rangle$ を求めて y に関する係数 $A(i, 4)$ を求めた (一覧表は略す)。 z, x, c に関する係数 ($k = 1, 2, 3$) では $|A(i, k)|$ は $1 \sim 0.1$ のオーダーの値 (厳密に 0 のものもある) である。 $|A(i, 4)|$ は $i = 1 \sim 25$ のデータでは $|A(i, 4)| < 0.001$ であるので $A(i, 4)$ はゼロとみなす。しかし 3 ケのデータ、 $i = 26, 27, 28$ (これは $v = 0, E_{2_2} - 2_1, E_{3_2} - 3_1, E_{4_2} - 4_1$ である) では、 $A(i, 4)$ はそれぞれ $-0.018, -0.064, -0.090$ と比較的大きく、他のデータの z, x, c の係数と comparable であるので、この 3 ケは 4 パラメーターの最小二乗法で解析する。 4 パラメーターによる解析について個々のデータの $o-c$ の結果は省略するが、3 パラメーターの結果 [1] とあまり差はない。得られた g テンソルを表 1 に示す。比較のため今までに得られた 3 パラメーターの結果 [1] を Lankhaar 達の *ab initio* の結果 [3] ものせた。

表1 CH ₃ OH の g tensor			
	3 パラメーター ^a	4 パラメーター ^a	文献 [3] ^a
g_{aa}	0.305 (0.006)	0.307 (0.006)	0.325
g_x	-0.425 (0.003)	-0.425 (0.002)	
g_{bb}	-0.059 (0.004)	-0.059 (0.004)	-0.056
g_{cc}	-0.039 (0.004)	-0.039 (0.004)	-0.033
g'_{ab}	—	0.134 (0.104)	g_{ab} 0.139 ^b
			g_{ba} 0.027 ^b
g_α	0.224 (0.006)	0.226 (0.006)	b_a 0.346 (g_α 0.347 [8])
Notes			
^a 異なる方法により得られた g テンソルの値 () 内は Fitting から生ずる誤差			
^b $g_{ab} + g_{ba} = g'_{ab}$ とすると、 $g'_{ab} = 0.166$			

4 パラメーターの結果と今までの 3 パラメーターのもの比べると g'_{ab} 以外では誤差範囲内で一致している。 g'_{ab} は誤差は大きいながらも求められた。 Lankhaar 達の *ab initio* 計算と比較すると g_{aa}, g_{bb}, g_{cc} については近い値が出ている。 g'_{ab} は *ab initio* の $g_{ab} + g_{ba}$ と誤差範囲では一致している。 g_α の値は大きく異なる

が Lankhaar 達は *ab initio* では計算できず CH₃NO₂ の値から推定している [4]。

4. まとめ

4 パラメーターと 3 パラメーターの結果を比較すると殆ど差はなく 5%程度の精度の取り扱いでは 3 パラメーターでよい。即ち、そこで用いた近似でよいことが分かった。 g'_{ab} の値は誤差は大きいながらも求めることができたので、今後の研究により、より精度の高い値が得られる可能性がある。

References

- [1] 高木、常川、小林、廣田、松島、分子分光研究会 (2018)
- [2] C. C. Lin & J. D. Swalen, Rev. Mod. Phys. **31**, 841 (1959)
- [3] B. Lankhaar et al., Nat.As. **2**, 145 (2018)
- [4] L. Engelbrecht et al. Z.Naturforsch. **28a**, 709 (1973)