

# D<sub>2</sub>-HCN 分子錯体のミリ波分光

(岡山大<sup>a</sup>, 九大<sup>b</sup>) ○唐健<sup>a</sup>・原田賢介<sup>b</sup>・川口建太郎<sup>a</sup>・田中桂一<sup>b</sup>

Observation of Millimeter-wave spectrum for D<sub>2</sub>-HCN

(Okayama Univ.<sup>a</sup>, Kyushu Univ.<sup>b</sup>) Jian Tang<sup>a</sup>, Kensuke Harada<sup>b</sup>, Kentaro Kawaguchi<sup>a</sup>, Keiichi Tanaka<sup>b</sup>

Although the H<sub>2</sub>-HCN complex has been studied by infra-red and microwave spectroscopy, D<sub>2</sub>-HCN was only studied by infrared spectroscopy. In this study, we observed the millimeter-wave spectrum of para-D<sub>2</sub>-HCN which has a linear configuration for D<sub>2</sub> at the N end of HCN with a deeper potential well than ortho-D<sub>2</sub>-HCN has.

H<sub>2</sub>-HCN 分子錯体はヘリウムナノ液滴中の赤外分光<sup>1,2</sup>、気相中の赤外分光<sup>3</sup>、ミリ波分光<sup>4</sup>、およびフーリエ変換マイクロ波分光<sup>5</sup>で研究されている。オルト H<sub>2</sub> (*o*H<sub>2</sub>) は HCN の N 側に直線構造で結合し、パラ H<sub>2</sub> (*p*H<sub>2</sub>) は HCN の H 側に T 字構造で結合する。*o*H<sub>2</sub>-HCN は *p*H<sub>2</sub>-HCN より 11.6 cm<sup>-1</sup> 深い結合エネルギー  $D_e = 195.2$  cm<sup>-1</sup> を持つ<sup>6</sup>。D<sub>2</sub>-HCN についてはヘリウムナノ液滴中の赤外分光で *o*D<sub>2</sub>-HCN と *p*D<sub>2</sub>-HCN が観測されたが、気相中の赤外分光では *p*D<sub>2</sub>-HCN だけが観測されている。本研究では *p*D<sub>2</sub>-HCN のミリ波スペクトルを初めて観測したので報告する。

ホワイト型多重反射ミリ波分光器を九州大学から岡山大学に移設して観測に用いた。HCN(0.6%), D<sub>2</sub>(25%), Ne(75%) の混合ガスを 15 atm の押し圧でパルスノズルを用いて超音速ジェット中に D<sub>2</sub>-HCN を生成した。気相中の赤外分光<sup>3</sup>で観測された *p*D<sub>2</sub>-HCN の分子定数を用いて予測したミリ波回転遷移の周波数付近約 1 GHz を測定した結果、予測周波数から約 200 MHz 離れた場所で観測された 3 本のスペクトルを *p*D<sub>2</sub>-HCN の J=4-3, 5-4, 6-5 回転遷移に帰属した。赤外分光の振動回転遷移との同時解析により、有効的な回転定数 *B*, *D*, *H* が得られた。

*p*D<sub>2</sub>-HCN は *o*H<sub>2</sub>-HCN と同様に HCN の N 側に *p*D<sub>2</sub> が結合した直線構造を持ち、HCN の H 側に *o*D<sub>2</sub> が結合した T 字構造を持つ *o*D<sub>2</sub>-HCN より深い  $D_e$  がある。気相中の赤外分光<sup>3</sup>では T 字構造を持つ *p*H<sub>2</sub>-HCN および *o*D<sub>2</sub>-HCN とも観測されなかったが、ミリ波分光<sup>4</sup>および FT マイクロ波分光<sup>5</sup>では *o*H<sub>2</sub>-HCN と *p*H<sub>2</sub>-HCN の両方が観測されている。水素分子では *o*H<sub>2</sub>:*p*H<sub>2</sub> = 3:1, *o*D<sub>2</sub>:*p*D<sub>2</sub> = 2:1 である。*o*D<sub>2</sub>-HCN は結合エネルギーが小さいため生成効率が 1 ケタ少ないが、観測可能と考えられるので、今後観測を進める予定である。

## References

- 1) K. Nauta & R. E. Miller, *Science*, 283, 1895 (1999).
- 2) D. T. Moore, M. Ishiguro, & R. E. Miller, *J. Chem. Phys.* 115, 5144 (2001).
- 3) D. T. Moore et al., *J. Chem. Phys.* 115, 5137 (2001).
- 4) M. Ishiguro et al., *J. Chem. Phys.* 115, 5155 (2001).
- 5) M. Ishiguro et al., *Chem. Phys. Lett.* 554, 33 (2012).
- 6) O. Denis-Alpizar et al., *J. Chem. Phys.* 139, 224301 (2013).