

分光実験と量子化学計算による星間分子の電子遷移波長の推定

(東京理科大学 赤外自由電子レーザー研究センター) 荒木光典

araki@rs.kagu.tus.ac.jp

Diffuse Interstellar Bands (DIBs) とは、恒星と地球の間にある希薄な分子雲の中にある分子による吸収線のことである。その最初の報告は 1922 年で、現在までに可視から近赤外の領域にわたり 600 本程度検出されているが、分子種の同定はされていない。しかしそれらは、生命起源や惑星材料としての視点から注目されている。そして、宇宙空間での芳香族化合物の存在は強く指摘されており、芳香族化合物が DIBs のキャリア候補である可能性は強い。そこで我々はその実験室分光を試みている。

最初に、フェニルチオラジカル C_6H_5S の電子遷移の吸収スペクトルを放電と組み合わせた Cavity Ring Down 分光法により測定した¹。硫黄を含む星間分子はこれまで発見されている星間分子全体の 1 割だが、酸素を含む星間分子は 3 割を占める。そこで、フェノキシラジカル C_6H_5O にも着目し、その電子遷移の吸収スペクトルを測定した (図 1)。量子化学計算 (TD-B3LYP/cc-pVTZ) から、その振動構造を帰属した²。

これらの測定には、各 1 年の歳月を要した。より多くの分子の測定を行って帰属を試みることは、実験室分光だけでは限度がある。より網羅的な研究を行う必要がある。そこで、フェノキシラジカルのメチル基置換体について、量子化学計算をもとにスペクトルを予想し、実験値によってそれを補正する試みを行なった。その一つとして、4-メチルフェノキシラジカルのスペクトルの電子遷移波長と振動構造を推定した (図 2)。これらの情報から、各分子の DIBs との比較検討を行った²。

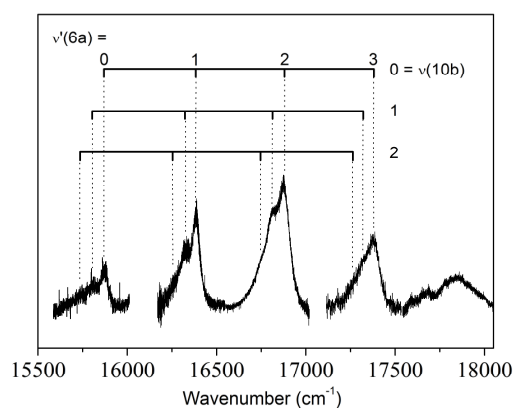


図1、Cavity Ring Down 分光法によるフェノキシラジカルの $B^2A_2 - X^2B_1$ 遷移の振動構造 (実測)

[1] Araki *et al.*, *Astronomical J.*, **148**, 87 (2014)

[2] Araki *et al.*, *Astronomical J.*, *submitted*.

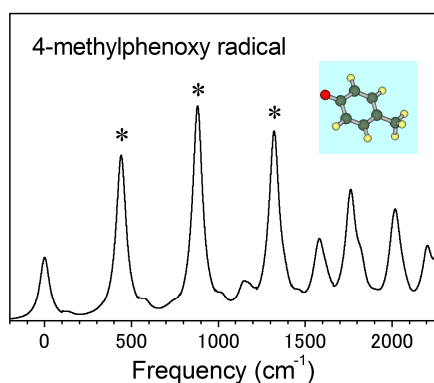


図2、4-メチルフェノキシラジカルの $B^2A_2 - X^2B_1$ 遷移の振動構造 (推定) *印のピーク波長がそれぞれ 5594 ± 25 、 5736 ± 27 、 $5884 \pm 28 \text{ \AA}$ と推定された。