

3-3 分子構造研究系

分子構造学第一研究部門

齋藤修二(教授)*)

A-1) 専門領域：高分解能分子分光、宇宙電波分光

A-2) 研究課題：

- a) 星間関連短寿命分子のミリ波・サブミリ波分光と分子構造
- b) サブミリ波・遠赤外高感度分光法の開拓
- c) 分子雲の星間化学
- d) サブミリ波望遠鏡の開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 短寿命分子のミリ波・サブミリ波分光法と分子構造

a-1) FO ラジカルのサブミリ波スペクトルの検出

FOラジカルは酸化ハロゲンラジカルの中でも最も基本的なラジカルであり、フッ素の酸化反応や含フッ素有機化合物の酸化反応において要となるラジカルである。70年代後半、その赤外スペクトルが主にレーザー分光法により明らかにされて以来、FOラジカルのマイクロ波スペクトルの検出が多くの研究者により試みられてきた。しかし、その双極子モーメントが非常に小さい($\mu_0 = 0.0043D$)ため長い間未検出であった。今回、電子基底状態にあるFOラジカルの磁気双極子許容純回転遷移を220–410 GHzのミリ波サブミリ波領域でマイクロ波分光としては初めて検出、測定することができた。FOラジカルの生成には効率の良いオゾンとフッ素原子の反応を用いた。スペクトルを解析の結果、回転定数、遠心力歪定数、型結合定数、フッ素核の超微細結合定数などを非常に精密に決定することができた。FOラジカルの分光学的な特性の解明がこれにより最終的に終了した。

a-2) 新しい遷移金属水酸化化合物, CuOH, AgOHおよび同位体種のマイクロ波スペクトル：分子構造と分子力場の決定

前年度のリポートで、遷移金属水酸化化合物であるCuOHのマイクロ波スペクトルを初めて検出したことを報告した。これに続いて、AgOHのマイクロ波スペクトルも初めて明らかにした。両水酸化物は、これまで知られている多くの金属水酸化物と異なり、直線ではなく曲がった構造を示す。初めての遷移金属水酸化物の精密な構造と結合状態を明らかにする目的で、今回、両種の重水素置換体のマイクロ波スペクトルを測定した。それぞれの分子種について得られた分子定数から分子力場を決定し、これを用いて、調和振動の効果を除いた零点平均構造を精密に決定した。この結果、これらの分子の金属-酸素結合が典型的なイオン結合と共有結合の間にあることが明らかになり、両結合の力の釣り合いとして金属-OH結合が三角形になることが明瞭に示された。

b) 重水素化合物の星間化学 重水素濃縮と分子雲コアの進化年齢：前年度のリポートで、星間重水素化合物の重水素濃縮度を利用すれば、分子雲コアの進化年齢を見積もることができることを、牡牛座暗黒星雲 TMC-1 のリッジについて、 $c\text{-C}_3\text{HD}$ の濃縮度を用いて示した。その後、この方法の適用範囲や信頼性を調べる目的で、分子雲の水

素密度, 金属原子の存在度, C及びO原子の存在度, さらには宇宙線によるイオン化率に対する濃縮度の依存性を調べた. その結果, TMC-1のような一つの分子雲については, 金属存在度, C/O存在度, イオン化率はある程度一定と仮定できるが, 水素密度の変動は考慮する必要があることが分かった. さらに, c-C₃HDの生成の要の反応である C₃H₃⁺ + HD → C₃H₂D⁺ + H₂ が反応の出口に 4 eV 程度のポテンシャルバリアーを持つことが分かり, 高濃度の c-C₃HDの生成には別の経路を考慮する必要があることが分かった.

しかし, 表題の考え方は初めての提案なので, これを裏付ける実際例として, TMC-1について他に唯一報告されている DCO⁺にも適用し, TMC-1 リッジのコアの進化年齢を同様に見積もることができることを示した.

- c) サブミリ波望遠鏡の開拓: 我が国最初のサブミリ波望遠鏡である口径 1.2 m の電波望遠鏡を東京大学, 国立天文台, 分子科学研究所が共同で開発し, 富士山頂に昨年度設置した. 望遠鏡には 346 GHz および 492 GHz の受信機を備え, 衛星通信を利用して遠隔制御する. 昨年11月より今年2月まで, 中性炭素および¹³COのサブミリ波スペクトルを代表的な巨大分子雲, 暗黒星雲, 超新星分子雲についてサーベイ観測を行った. 特に中性炭素のスペクトル線輝度の分布から分子雲形成過程についての新しい情報が得られつつある. また, 今年度は中性炭素のもう一つのスペクトル線 (³P₂-³P₁) を観測する目的で 809 GHz の受信機を開発し, 今年夏望遠鏡に設置し, 今年冬から実際の観測に用いはじめた. この結果, 中性炭素の正確な柱密度の見積もりが可能となり, 分子雲形成初期過程の定量的な検討が容易になる.

B-1) 学術論文

H. S. P. MUELLER, H. KLEIN, S. P. BELOV, G. WINNEWISSER, I. MORINO, K. M. T. YAMADA and S. SAITO, “Terahertz Spectroscopy of the Amidogen Radical, NH₂,” *J. Mol. Spectrosc.* **195**, 177-184 (1999).

C. J. WITHAM, H. OZEKI and S. SAITO, “Microwave Spectroscopic Detection of Transition Metal Hydroxides: CuOH and AgOH,” *J. Chem. Phys.* **110**, 11109-11112 (1999).

M. ARAKI, H. OZEKI and S. SAITO, “Microwave Spectrum of the Inversion-Rotation Transitions of the D₃O⁺ Ion: Δk = ± 3n Interaction and Equilibrium Structure,” *Mol. Phys.* **97**, 177-183 (1999).

H. MAEZAWA, M. IKEDA, T. IYO, G. SAITO, Y. SEKIMOTO, S. YAMAMOTO, K. TATEMATSU, Y. ARIKAWA, Y. ASO, T. NOGUCHI, S. SHI, K. MIYAZAWA, S. SAITO, H. OZEKI, H. FUJIWARA, M. OHISHI and J. INATANI, “Large-Scale Mapping Observations of the C₁ ³P₁-³P₀ Line toward Heiles Cloud 2 in the Taurus Dark Cloud,” *Astrophys. J.* **524**, L129-L132 (1999).

S. SAITO and S. YAMAMOTO, “The Microwave Spectrum of a New-Phosphorus Bearing Radical CH₂P(²B₂),” *J. Chem. Phys.* **111**, 7916-7920 (1999).

M. TANIMOTO and S. SAITO, “Microwave Spectroscopic Study of the SiF₃ Radical: Spin-Rotation Interaction and Molecular Structure,” *J. Chem. Phys.* **111**, 9242-9247 (1999)

C. J. WHITHAM, H. OZEKI and S. SAITO, “Microwave Spectra of CuOD and AgOD: Molecular Structure and Harmonic Force Field of CuOH and AgOH,” *J. Chem. Phys.* **112**, 641-646 (1999).

B-3) 招待講演

S. SAITO, “High-Sensitivity Submillimeter-Wave Spectroscopy of Transient Molecules,” 54th International Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus (Ohio), June 1999.

S. SAITO, "Laboratory Millimeter- and Submillimeter-Wave Spectroscopy," Panel Discussion for Molecular Data Needs, IAU (International Astronomical Union) Symposium 197, Astrochemistry: From Molecular Clouds to Planetary Systems, Sogwipo (Cheju), August 1999.

B-4) 受賞, 表彰

齋藤修二, 分子科学研究奨励森野基金(1985).

齋藤修二, 仁科記念賞(1991).

齋藤修二, 東レ科学技術賞(1993).

B-5) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本分光学会東海支部幹事(1995-1999).

学会の組織委員

第 14 回フリーラジカル国際会議組織委員(1979).

環太平洋国際化学会議組織委員(1989).

第 20 回フリーラジカル国際会議組織委員(1989).

第 19 回赤外・ミリ波国際会議組織委員(1994).

第 24 回国際天文連合 (IAU) 総会 JD1 科学組織委員(2000).

文部省、学術振興会等の役員等

文部省学術審議会専門委員(1990-1994).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員(1991, 1992).

科学研究費の研究代表者, 班長等

重点領域研究「星間物質」班長(1991-1994).

社会的活動

岡崎市民大学講師(1997).

*) 1999 年 3 月停年, 8 月福井大学・遠赤外領域開発研究センター教授