

機関番号：13201

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2008～2010

課題番号：20740103

研究課題名 (和文) 星間有機分子に着目したスペクトル線データベースの構築

研究課題名 (英文) Development of spectral database to support observation of interstellar organic molecules

研究代表者

小林 かおり (KOBAYASHI KAORI)

富山大学・大学院理工学研究部・准教授

研究者番号：80397166

研究成果の概要 (和文)：

電波観測による分子の同定には実験室と電波観測の周波数の比較によって行われる。星形成領域ではメタノールやギ酸メチルなどの飽和有機分子のスペクトル線が多数観測されてきた。しかし、このような分子の同定に必要なスペクトル線データベースは量的、質的にも十分とは言えない。本研究では、有機分子の実験室での観測を行い、インターネットで周波数検索可能な分子のスペクトル線データベースとして供することで、このような必要性に応えた。

研究成果の概要 (英文)：

Interstellar molecules are identified by the comparison of the laboratory frequencies and those observed by the radio telescopes. Many spectral lines due to the saturated organic molecules like methanol and methyl formate have been observed. However, spectral database necessary for the identification is still qualitatively and quantitatively insufficient. In this study, laboratory microwave spectra of organic molecules are recorded and put the data through the online database so that our study supplements the needs to the database.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	2,300,000	690,000	2,990,000
2009 年度	500,000	150,000	650,000
2010 年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：分子分光学

科研費の分科・細目：天文学・天文学

キーワード：データベース

1. 研究開始当初の背景

ALMA は、日本、北米、欧州の機関による大型共同国際プロジェクトであり、わが国においては国立天文台が主体となって参加している。ALMA は既存のミリ波、サブミリ波観測装置に比べて桁違いに高い解像度と感度を持ち、21 世紀初頭における天文学を牽引するとともに、物理学・惑星科学・分子科学を

はじめとする多くの関連分野に波及効果をもたらすと期待される。

本研究で提案する研究を含め、分子スペクトル線データベースの構築は ALMA での観測データを最大限に活かし、かつ、新しい視点からの観測研究を開拓する上で非常に重要な課題である。これまでも、JPL/NASA のグループ、NIST のグループ、およびケル

ン大学のグループが独自にスペクトル線データベースを構築し、公開している。しかし、それらはALMAでの観測を考えると、量的、質的にも十分とは言えず、同位体種を含むより多くの分子種、より広い量子数範囲（振動および回転状態）、より広いエネルギー範囲をカバーするデータベースが必要となっている。

このような分子スペクトル線データベース構築自体を天文学者のみで行うことは無理があると思われる。分子スペクトル線の測定・解析に熟練していなければ、データの精度と確度を正しく評価することは容易ではないからである。一方、分子分光学の立場から見ると、対象とする分子はあまりにも基本的であり、既に本質的な部分で多くの研究がなされているものである。従って、それらの分子のスペクトル線のある周波数範囲で網羅的に測定し、それらのデータベースを構築すること自体は地味かつ時間のかかる研究であり、多くの他の研究課題の中にあっても埋没する傾向にある。しかし、ALMAでの必要性という天文学からの要請は、そのようなデータベース構築に新しい意義を与えるものであり、分光学的にも本格的に取り組む価値があると認識するに至った。

2. 研究の目的

星形成領域の電波スペクトル観測においては、 HCOOCH_3 、 $\text{C}_2\text{H}_5\text{CN}$ などの飽和有機分子のスペクトル線が豊富に観測される。それらの観測から、星形成領域における化学組成とその進化のみならず、星形成過程自体についての詳細な情報が得られる。この分子スペクトル線データベースの構築はALMA (Atacama Large Millimeter/submillimeter Array)での観測データを最大限に活かし、かつ、新しい視点からの観測研究を開拓する上で非常に重要な課題である。本研究ではこのような分子のスペクトル線データベースの構築がALMAを見据えて喫緊の課題となっていることに鑑み、 HCOOCH_3 などの重要なマイクロ波分光による測定を振動励起状態や同位体種も含めて行う。これにより、スペクトル線データベース整備に向けた国際的取り組みの一端を担うとともに、既存の観測装置による研究の拡がりを実現する。

3. 研究の方法

研究は次の4つの実験室における振動励起状態の分光測定

(1)ギ酸メチル分子はメチル基の内部回転の自由度を持つ。そのために、この分子の回転スペクトルは剛体回転子からはかけ離れたものとなり、非常に複雑な様相を示す。特に内部回転の励起状態ではその傾向が強く、そのため、励起状態でのスペクトル線について

は第一ねじれ振動励起状態が帰属・解析されたにすぎない。そこで、本研究では、主に富山大学の分光装置を用いて、励起状態の回転スペクトルの測定、解析を進める。

(2)実験室における同位体種の分光測定

ギ酸メチル分子の同位体種についての測定を行う。 DCOOCH_3 、 $\text{HCOO}^{13}\text{CH}_3$ を対象とした。重水素化物については、星形成領域において様々な分子で高い重水素濃縮が観測されていることから、天文学的に非常に重要であると考えられる。また、 ^{13}C 同位体種については、 HCOOCH_3 の生成メカニズムの情報を担うと考えられ、ALMAでの観測において必ずや重要なターゲットになると予想される。

(3)メタノール、エチルメチルエーテル、エタノール、酢酸メチルの実験室分光

メタノール、エチルメチルエーテル、エタノール、酢酸メチルはいずれも星間分子または星間分子候補である。これらの分子についても励起状態の同定や実験室分光での不足したデータなどを拡充した。

(4)過去の未同定線との比較

現在、オンライン等で公開されている未同定線と、研究室での測定結果を比較することで、未同定線の解明を目指した。

(5)データベースとしての公開

上記の測定データ、および、すでに保有しているノーマル種の基底状態のデータなどを総合して、ギ酸メチル分子に関するスペクトル線データベースを構築し、公開した。

4. 研究成果

星間分子として既に観測されているギ酸メチル、エタノールおよびエチルメチルエーテルと星間分子の新たな候補と考えられる酢酸メチルのマイクロ波分光を行った。

ギ酸メチルのノーマル種については本研究で分光計を改良して可能となったシンセサイザーによる測定を行い215-227 GHzの周波数領域の測定を行い、約7,000本の吸収線を得た。このデータを用いて基底状態と第1励起状態のスペクトルを確認し、第2振動励起状態のA対称種の帰属の拡張を行った。さらに金沢大学との共同研究を進め、これまで帰属されていない低振動励起状態の帰属を検討し、現在候補となる遷移が妥当であるか実験的に強度を調べることで確認を試みているところである。同位体種(DCOOCH_3 、 $\text{HCOO}^{13}\text{CH}_3$)については、50-75 GHz帯での測定・データ読み取りを行った。エタノールはジェット推進研究所との共同研究として、50-63 GHz帯の測定を行い、約2300本の吸収線を観測した。今後、未帰属の遷移について解析を進める予定である。メタノールについては ^{13}C 同位体について、215-228 GHz帯の測定を行った。エチルメチルエーテルについてはふたつのメチル基の内部回転の励起状

態と骨格ねじれ振動励起状態はエネルギー的に近いため、相互作用がする。この影響について定量的に検討を行った。この結果について、現在論文投稿中である。酢酸メチルはエチルメチルエーテルと同様、2つの非等価なメチル基を持つ分子である。フランス CNRS との共同研究として、50-59 GHz 帯の測定を行い、基底状態の帰属を行った。今後、振動励起状態の遷移について解析を進める予定である。

平成 21 年度に、解析を行ったギ酸メチルのねじれ振動第 2 励起状態の A 対称種のデータを過去の Turner らの Orion-KL のデータ中の未同定線中に探索を行った。当研究室の過去の野辺山 45 m 電波望遠鏡を用いた観測データを含めて、約 10 本のスペクトル線がギ酸メチルのねじれ振動第 2 励起状態によるものと決定した。

これらの新しく測定し、解析を終了したデータは、既に開設した主として分光学者と電波天文学者のためのホームページである <http://www.sci.u-toyama.ac.jp/phys/4ken/atlas/> に順次追加している。このホームページには国内外からのアクセスが確認されている。現在のところ 18 分子の約 13,000 本の吸収線が検索可能である。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 2 件)

① Kaori Kobayashi, Takanori Matsui, Shozo Tsunekawa, and Nobukimi Ohashi, “The microwave spectroscopy of *trans*-ethyl methyl ether in the $v_{29} = 1$ excited torsional state.” *Journal of Molecular Spectroscopy*, 255, 164-171 (2009) 査読有

② Kaori Kobayashi, Takanori Matsui, Norimichi Mori, Shozo Tsunekawa, and Nobukimi Ohashi, “The microwave spectroscopy of *trans*-ethyl methyl ether in the first skeletal torsionally excited state.” *Journal of Molecular Spectroscopy*, 251, 301-304 (2008) 査読有

[学会発表] (計 15 件)

① 酒井祐輔、柿本優、佐々木睦、小林 かつお、高野秀路

Orion KL におけるねじれ振動第 2 励起状態のギ酸メチルの同定

日本天文学会 2011 年春季年会、2011 年 2 月 20 日 (震災のため発表場所はなし)

② Takanori Ito, Hirofumi Shintai, Wakako Nomura, Kaori Kobayashi, and Shozo Tsunekaw, “Microwave spectroscopy of

13CH₃OH.” Workshop for Interstellar Matter 2010, Sapporo, September 13th-15th, 2010

③ Kaori Kobayashi, Keigo Murata, Shozo Tsunekawa, and Nobukimi Ohashi,

“Microwave spectroscopy of *trans*-ethyl methyl ether in the torsionally excited state 3” The 65th Ohio State University Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus, Ohio, USA, June, 2010

④ Kaori Kobayashi, Shozo Tsunekawa, Fusakazu Matsushima, Satoshi Yamamoto, Masatoshi Ohishi and Ken'ichi Tatematsu,

“Toyama Microwave Atlas, microwave database for ALMA age” The Second Tokyo-NRO Workshop, Chemical Diagnostics of Star and Planet Formation, Tokyo, March 5th, 2009

⑤ 山内 孝修, 舘 遥風, 小林 かつお, 常川 省三, 桑野 恵, 藤竹 正晴, 大橋 信喜美, 林 直人, 樋口 弘行

マイクロ波分光によるギ酸メチル同位体 (HC0013CH₃) の研究

第 3 回分子科学討論会、名古屋、2009 年 9 月 22 日

⑥ Haruka Tachi, Kaori Kobayashi, Shozo Tsunekawa, Megumi Kuwano, Masaharu Fujitake, Nobukimi Ohashi, Naoto Hayashi, Hiroyuki Higuchi,

“Microwave spectroscopy of methyl formate isotopomer (HC0013CH₃)”

The 64th Ohio State University Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus, Ohio, USA, June 25th, 2009

⑦ 小林 かつお, 松井 孝憲, 森 法道, 常川 省三, 大橋 信喜美

エチルメチルエーテルにおける inverted A/E sequence pattern とねじれ振動間の相互作用 第 9 回分子分光研究会、富山、2009 年 5 月 15 日

⑧ Kaori Kobayashi, Shozo Tsunekawa, Fusakazu Matsushima, Satoshi Yamamoto, Masatoshi Ohishi and Ken'ichi Tatematsu, “Toyama Microwave Atlas, microwave database for ALMA age”

The Second Tokyo-NRO Workshop, Chemical Diagnostics of Star and Planet Formation, Tokyo, March 5th, 2009

⑨ Kaori Kobayashi, Shozo Tsunekawa, Fusakazu Matsushima, Satoshi Yamamoto, Masatoshi Ohishi and Ken'ichi Tatematsu,

“The release of a new molecular line database toward the ALMA era, “the Toyama Microwave Atlas””

The 5th ALMA Japan-Taiwan science workshop, Hsinchu, Taiwan, December, 10th, 2008

⑩ 小林 かつお, 高村 一徳, 常川 省三, 大橋 信

喜美

マイクロ波分光によるギ酸メチルねじれ振動第2励起状態の研究

第2回分子科学討論会、福岡、2008年9月24日

⑪ Kaori Kobayashi, Hitoshi Odashima, and Shozo Tsunekawa

“Rotational transitions of Methyl Formate in Laboratory and in Space”

The 8th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Perth, Australia, November 28th, 2008

⑫ Kaori Kobayashi, Takanori Matsui, Shozo Tsunekawa, and Nobukimi Ohashi,

“Microwave spectroscopy of t-ethyl methyl ether in the torsionally excited state 2.”

The 63rd Ohio State University Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus, Ohio, USA, June 18th, 2008

⑬ 村田景悟、小林かおり、常川省三、大橋信喜美

マイクロ波分光による骨格ねじれ振動第2励起状態のエチルメチルエーテルの研究

第2回分子科学討論会、福岡、2008年9月24日

⑭ 小林 かおり、常川省三、松島房和、山本智、大石雅寿、

ALMA に向けた分子線データベース (Toyama Microwave Atlas) の公開

日本天文学会 2008 年秋季年会、岡山、2008年9月11日

⑮ 森法道、松井孝憲、小林かおり、常川省三、大橋信喜美

マイクロ波分光によるねじれ振動励起状態 ($v_{28}=1$) のエチルメチルエーテルの研究

第8回分子分光研究会、神戸、2008年5月16日

[その他]

ホームページ等

<http://www.sci.u-toyama.ac.jp/phys/4ken/atlas/>

受賞

2010年6月5日 第12回守田科学研究奨励賞 「新しい電波望遠鏡のためのマイクロ波データベースの構築」

アウトリーチ活動

第3回富山大学理学部サイエンスカフェ「オリオンにある分子を見る」

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小林 かおり (KOBAYASHI KAORI)

富山大学・大学院理工学研究部・准教授

研究者番号 : 80397166

(2) 研究分担者 ()

研究者番号 :

(3) 連携研究者 ()

研究者番号 :