マイクロ波2重共鳴分光法による Kr-OCS クラスターの電気双極子モーメントと分子構造に関する考察

(群馬大院理工)○大沢悠太朗・住吉吉英

A study on the electric dipole moment and molecular structure of the Kr-OCS cluster by microwave double resonance spectroscopy (*Graduate School of Science and Engineering*, Gunma University)

OYutaro Osawa, Yoshihiro Sumiyoshi

We performed MW-MW double resonance spectroscopy using two coherent microwaves (MW) with different frequencies on molecular clusters generated in a supersonic jet, observed the light-shift effect, and showed that the electric dipole moment of the molecular cluster can be determined from the information obtained ¹⁾. In this study, we have applied the technique to the Kr-OCS cluster. We have newly observed total of 20 pure rotational transitions with high-J value, which has not been reported in a previous paper ²⁾. In combination with the transition frequencies reported in the previous paper, we have determined new molecular constants including the sextic distortion constants by least-squares analysis using an asymmetric top Hamiltonian. We also observed the light-shift effect and estimated the value of the electric dipole moment μ_b . The molecular structure was discussed based on the value of μ_b .

Keywords; Microwave Spectroscopy; Intermolecular Interaction; Microwave Double Resonance Spectroscopy

我々は、超音速ジェット中で生成した分子クラスターに対して、異なる周波数を持つ2種類のコヒーレントなマイクロ波(MW)を用いた MW-MW 二重共鳴分光を行うことでライトシフト効果を観測し、その情報から分子クラスターの電気双極子モーメントを決定できる事を示した $^{1)}$. 今回、クリプトン Kr と硫化カルボニル分子 OCS から成る Kr OCS クラスターを対象に、過去の論文 $^{2)}$ には報告されていない、回転量子数 J が大きな純回転遷移を含む遷移 20 本を新たに観測した.過去に報告されている遷移周波数と合わせて、非対称コマ分子のハミルトニアンを用いて最小二乗解析を行い、6次の遠心力歪定数を含めた分子定数を決定した.また、ライトシフト効果を観測し、Kr-OCS の電気双極子モーメント μ の値を見積もった.その情報を基に分子構造について議論した.

- 1) 石橋泰斗, 新井健太, 住吉吉英, 日本化学会関東支部群馬地区研究交流会 P-04 (2018)
- 2) F.J.Lovas and R.D.Suenram, J.Chem. Phys. **87**,2017(1987)