

Q24b キノン環やイミノ基を含む PAH 関連種の理論計算による ISM の探索

藤田翔 (新居浜高専), 梨本真志 (新居浜高専)

未同定赤外線放射 (UIR) を放出する星間物質 (ISM) の候補として多環芳香族炭化水素 (PAH) や PAH 関連種が提唱されている。ISM の候補として窒素や酸素を含んでいる PAH 関連種以外にプロトン化された PAH, PAH と Fe の錯体などが考えられている。現在, 窒素含有 PAH 関連種およびカチオン状態の PAH・PAH 関連種は注目されている候補の一つである。しかし, これらの候補には観測と同様の結果を示す点も確認できるが, いずれも UIR の起源を同定するには決定打に欠けるので別の可能性を探することは非常に重要である。我々は新たな可能性を探るため, 非芳香族性で環状のジケトン構造であるキノン環を含む多環芳香族キノンや $-C=NH$ の構造を持つイミノ基を導入した PAH 関連種を対象に, 理論計算の一つの手法である密度汎関数法を用いて, PAH 関連種の IR スペクトルの研究を行った。UIR の主要ピークである 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.2, 12.7 μm に対して, 一部の化合物において特に 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 μm で観測結果と同様の傾向を示すことが分かった。またイミノ基導入の PAH 関連種では振動運動において N-H 伸縮振動を含んでいるが, 中性状態において N-H 伸縮運動の IR 強度は非常に小さく, 窒素を導入したことによる全体の IR 強度を増加させるという効果も確認された。

理論計算により計算した IR スペクトルを使用し, キノン環を含む多環芳香族キノンやイミノ基を導入した PAH 関連種の UIR を放出する ISM としての可能性の検証結果を報告する。