

日本分光学会九州支部講演会

Isabelle Kleiner 博士 講演会

Paris 大学, 天文物理研究所, CNRS, 研究主幹

演題：[大振幅振動を持つ分子の分光計測；分子構造から天体物理学へ旅の物語]

日時：8月5日（月）15時半より17時まで

場所：九州大学理学部化学教室

（伊都キャンパス ウエスト1号館 講義棟301室）

Kleiner 博士はフランスの Paris 大学の天文物理学研究所で、メチル基の回転やプロトン移動などの大振幅運動を持つ分子の、理論的また実験的研究を精力的に進められています。特に大振幅運動を持つ分子の正確な Hamiltonian を開発して、最近の精密分光の実験結果の検証に大きな成果を挙げられています。

また、大振幅運動を持つ分子の宇宙空間での電波天文学による検出と分子進化との関連や、生体分子や有機分子の構造と大振幅運動との相関の研究を進め、その成果は国際的に高く評価されています。香水や生物ホルモンと大振幅運動を持つ分子についてもお話しいただける予定です。今回、福岡を訪問される機会に日本分光学会との共催で講演をお願いいたしました。

連絡先：九州大学大学院理学院理学研究院

田中桂一（i-SPES）、寺寄亨

Spectroscopy of molecules with large amplitude motions : a journey from molecular structure to astrophysics

I. Kleiner¹

**¹Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques, CNRS, UMR7583,
Université Paris Est-Créteil et Université de Paris Cité**

The topic of my seminar will concern molecules with one or two methyl (CH₃) internal rotors. Internal rotors are present everywhere in our environment, and they are important indicators of the physico-chemical conditions which exist in it. They are also excellent “sensors” for molecular structure determinations.

The high resolution microwave, millimeter and infrared spectra of those molecules cannot be treated by traditional Hamiltonian methods [1]. Theoretical methods and codes have been developed to calculate the energy levels, and then to fit the observed line positions for internal rotors. I will first briefly review those theoretical approaches.

Using these theoretical approaches and state-of-the-art experimental data, reliable predictions of line positions and intensities for astrophysical molecules containing one internal rotor CH₃ or two-top molecules can be provided [2]. Several internal rotors of interstellar interest will be presented as well as the latest results obtained with a code dealing with one Large-Amplitude Rotatory Motion and one Large-Amplitude Oscillatory Motion [3].

Internal rotation splittings can be also used to acquire knowledge on structural properties for small organic molecules or biomimetic molecules. In this talk, I will show results for molecules containing internal rotors, which are prototype for odorant molecules, phytohormones or bee pheromones. Recent results obtained on methyl and dimethyl derivatives of five or six-membered nitrogen aromatic rings of biological interest will be also presented.

This work has been supported by French National programs PCMI (Programme National de Physique Chimie du Milieu Interstellaire) and LEFE (Les Enveloppes Fluides et l'Environnement) of CNRS.

[1] C. Lin and J. D. Swalen, *Rev. Mod. Phys.*, **1959**, 31, 841-892.

[2] I. Kleiner, *ACS Earth and Space Chemistry*, **2019**, 3, 1812-1842.

[3] I. Kleiner and J. T. Hougen, *J. Mol. Spectrosc.*, **2020**, 368, 111255.