

Q28b 星間分子 C_nH ($n=3-8$) の異性体の構造と観測可能性

高橋 順子 (国立天文台) 村上 明德 (三菱化学)

直鎖状炭素鎖分子 C_nH ($n=3-8$) は、暗黒星雲内部で発見された代表的な星間分子であるが、それらの存在比や生成機構については、まだまだ解明されていない点が多い。近年、 C_3H には、3員環を持つ構造異性体 (cyclic- C_3H) のあることが発見され、直鎖状 C_3H (linear- C_3H) とエネルギー的に近く、存在量もかなり大きいことがわかった。しかも、両者は、イオン-分子反応によらず、 $C(^3P) + C_2H_2$ という中性分子反応によって生成することがわかった。そこで、 $n = 4$ 以上の C_nH についても、新たな構造異性体の存在と、それらの観測可能性を検討してみた。

非経験的分子軌道法及び密度汎関数法による量子化学計算によって、 C_nH ($n=3-8$) のいろいろな構造異性体の平衡構造、安定性、及び、双極子モーメントを求めた。得られた結果は以下の通りである。

1) C_nH ($n=3, 5, 7$) では、直鎖状構造の次に3員環を持つ構造異性体が安定である。 C_3H では、直鎖状構造と3員環構造がほとんどエネルギー的に等しい。 C_5H 、 C_7H となるにつれ、直鎖状構造と3員環構造のエネルギー差がそれぞれ、約 4 kcal/mol、約 15 kcal/mol、と増大する傾向が見られる。

2) C_nH ($n=4, 6, 8$) では、直鎖状構造の次に n 員環を持つ構造異性体が安定である。 C_4H 、 C_6H となるにつれ、直鎖状構造と n 員環構造のエネルギー差がそれぞれ、約 23 kcal/mol、約 15 kcal/mol、と減少する傾向が見られる。一方、同じ直鎖状構造でも、基底電子状態 $^2\Pi$ に対し、準安定状態 $^2\Sigma$ が存在し、 C_4H 、 C_6H となるにつれ、それらのエネルギー差は、約 0.3 kcal/mol、約 3 kcal/mol、と増大する傾向が見られる。

3) 双極子モーメントは、 C_3H 、 C_5H 、 C_7H となるにつれ、大きくなる。一方、 C_4H 、 C_6H 、 C_8H 、となるにつれ、小さくなる。

以上のことから、 C_5H 、 C_7H の3員環を持つ構造異性体は、星間空間での今後の観測可能性が示唆される。観測を支援するために、回転定数、IR スペクトルなどの分光学的諸情報も計算した。