

Q30b

Dissociative Recombination of H_3^+ . II

田代 基慶 (京大物理)、加藤 重樹 (京大化学)

H_3^+ は種々のイオン分子反応を経て複雑な分子を星間雲内部に作るため、星間化学で最も重要な分子の1つである (e.g., Herbst & Klemperer 1973)。また星間雲内部での存在が確認されたことで最近注目されている分子でもある (Geballe & Oka 1996:dense clouds, McCall et al. 1998:diffuse clouds)。星間雲内の H_3^+ は宇宙線による電離で生じた H_2^+ と H_2 の衝突で形成される。一方で、中性分子 (CO 等) や電子との衝突によって解離する。したがって宇宙線による H_2 の電離率や CO、電子との反応による H_3^+ の解離率がこの分子の存在量を決める基礎的なパラメータであり、これらの値を使って観測結果が解釈される。このパラメータの内、電子と H_3^+ の解離性再結合率は実験室値と理論値に 2-3 桁の差があり、最初の計算から 20 年たった今でもその差は埋まっていない。理論計算による正確な再結合率の導出、解離過程の理解が望まれる。また、 H_3^+ は一番単純な多原子分子であり、その再結合過程の理解はより複雑な分子の関与する過程を理解する上で重要である。

昨年の秋季年会では以前の仕事 (Kulander & Guest 1979, Michels & Hobbs 1984 など) の問題点を指摘した上で、より正確な解離性再結合率を得るために必要な手続きを述べた。本ポスター講演では、 H_3 の電子状態に関する計算 (解離状態および電子励起状態のエネルギー曲面、電子状態間の非断熱結合)、それによって得られる解離過程の描像等を発表する。