

Q14b

Dissociative Recombination of H_3^+ . III

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。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。 H_3^+ の主要な解離過程の1つは電子との解離性再結合反応であるが、実験で得られる反応率のばらつきが大きく長年問題になっていた。また実験室値と理論値にも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。

我々は量子動力学的手法を用いて H_3^+ の解離性再結合過程を調べた。 H_3^+ の再結合反応は主に、(1) 振電相互作用による H_3 Rydberg 状態間の遷移、(2) H_3 の 2s Rydberg 状態から解離的な価電子状態への遷移、と2つの過程に分けて考えることが出来る。我々は(1)の過程を Rydberg 電子と核の運動を同時に取り扱う手法で調べた。(2)の過程に関しては 2s Rydberg 状態と価電子状態間の非断熱結合行列要素を計算し、振動励起した 2s Rydberg 状態の解離率を求めた。本発表ではこれらの結果をもとに全反応過程に関する議論を行う。