

Q14a  $C_4H$  の双極子モーメントの改訂および存在量異常の解消

小山 貴裕 (東京理科大学), 尾崎 裕測 (群馬大学), 住吉 吉英 (群馬大学), 荒木 光典 (東京理科大学), 高野 秀路 (日本大学), 南 賢明 (東京理科大学), 大杉 歩 (東京理科大学), 祖母井 杏耶 (東京理科大学), 久世 信彦 (上智大学), 築山 光一 (東京理科大学)

$C_nH$  ( $n = 2 - 8$ ) 分子は最も単純な炭素鎖分子のシリーズであり, 若い分子雲のトレーサーとして不可欠な化学種である。しかし,  $C_4H$  の星間空間での存在量が, しばしば異常な値を示すことが知られている。具体的には, 様々な天体で報告されている  $C_4H$  の柱密度は, シュミレーションの結果より一桁大きい。その原因は柱密度の解析に用いた  $C_4H$  の双極子モーメントの理論計算値にある。一般的な量子化学計算法では, 電子基底状態  $^2\Sigma^+$  の双極子モーメントは, 比較的小さな値 (0.87 D) となる。しかし, 基底状態のすぐ近くに大きな双極子モーメント (4.4 D) を持つ電子励起状態  $^2\Pi$  があり, これら二つの状態の混合が起こる。その結果, 基底状態は大きな双極子モーメントを持つことが予想される。より大きな双極子モーメントを用いると, 観測されたライン強度から, より小さな柱密度が導かれる。しかし, これまでこの混合を考慮した  $C_4H$  の双極子モーメントの量子化学計算は行われていなかった。そこで本研究では, この混合を考慮した多配置間相互作用法 (MRCI) を用いて  $C_4H$  の双極子モーメントの再計算を行った。計算の結果, 双極子モーメントは 2.366 D と求まり, 従来の 0.87 D より約 3 倍大きな値となった。改訂された双極子モーメントを用いて様々な天体における  $C_4H$  の柱密度を再計算した結果, これまで考えられていた値より約一桁小さいことが明らかになった。また,  $C_nH$  分子について柱密度の対数を取ると, これらが一つの直線上に並んだ。ここから  $C_nH$  分子が逐次的な生成反応で炭素鎖が伸長していった可能性が考えられる。