## 3Ta07

## 星間化学反応と低温下の分子衝突

## (岡山大理) 川口 建太郎

【序】これまで120以上の分子種が星間空間、晩期型星周辺部で検出されている。その生成反応として[1]イオン・分子反応、[2]星間ダスト上での反応、[3]中性・中性分子反応、[4]星形成領域におけるショック波やOutflow(原始星からの物質の流れ)によって誘起される反応、[5]宇宙線(高エネルギー(>100 MeV)のプロトン)によるH<sub>2</sub>, He のイオン化およびそれに引き続いて起こる反応、が考えられている。また低密度雲や晩期型星周辺部の密度の低いところでは[6]光分解反応の寄与が大きく、CN, CCH ラジカルなどが生成している。

イオン・分子反応は活性化エネルギーなしに速い速度で進行するので、低温での分子生成に重要な役割を担っている。実際 HCO<sup>+</sup>, HCNH<sup>+</sup>等のイオン種が検出されている。また HCN に対する HNC のような準安定状態の分子が多数検出されている事は、前駆体としてイオン種を仮定し、 電子との再結合反応過程で生成する機構で説明される。

[3]の中性・中性分子反応は通常大きな活性化エネルギーを必要とするため、低温の星間空間では一般にはおこりにくいが、ラジカルと不飽和分子の反応やラジカル・ラジカル反応の中には活性化エネルギーなしに進行するものがある。様々な提案がなされているが、実際どの程度の寄与があるのか定量的には見積もられていない。そして、依然、イオン・分子反応が主と考えられる傾向が強い。ここではHC<sub>3</sub>N分子を例に低温の星間空間における反応と、水素分子との衝突により励起される分子の回転準位の問題を考える。上記の[4]は星間空間でも比較的、温度が高い所で重要になり、また暗黒星雲を考えるので[6]の効果は雲の周辺部のみで効くのでここでは考慮しない。

【イオン・分子反応と中性・中性分子反応】

直線状のシアノポリイン分子 HC<sub>n</sub>N(n=1,3,5,7,9,11)は暗黒星雲、晩期星周辺部で観測される代表的な分子である。その中で HCCCN にはエネルギーの低い順に HCCNC(0.8 eV), HNCCC(2.2 ev) HCNCC(3.7 eV)の準安定状態の異性体(括弧内に HCCCN とのエネルギー差を示す)が存在する。それらの暗黒星雲 TMC-1 ( $T_k \approx 10 \text{ K}$ ) での存在量を柱密度により図1に示す。

準安定状態の異性体が 10 K 程度の

低温下で生成するには、前駆体と して HCCCNH<sup>+</sup>, HCCNCH<sup>+</sup> と電子 との再結合反応が最も寄与が大きい と考えられる。観測では HCCCN に 比べて HNCCC の存在量は非常に少 い。([HNCCC]/[HCCCN]= 0.0024) そこで、大部分の HCCCN は CN+HCCH → HCCCN+H (1)

で生成すると仮定された<sup>1</sup>。 長村のグループによる理論計算で は反応(1)は活性化エネルギーなしに 進行できることが示された<sup>2</sup>。また 長村らは

 $C_2H + HNC \rightarrow HCCCN + H$  (2) も活性化エネルギーなしに進行する



図 1 HCCCN, HCN と異性体種のエネルギー関係, 数値はおう し座分子雲 TMC-1 における存在量を柱密度 10<sup>12</sup> /cm<sup>2</sup> 単位で示す。

事を指摘した。Balucani 等の交叉分子線実験でも反応(1)が研究された<sup>3</sup>。低温領域では重い同 位体種を含む分子の存在量が増加する。主な理由は同位体種間の振動の零点エネルギーの差が、 反応している所の温度に比べて無視できないほど大きいからである。高野等は HCCCN の同位体 種の観測により、HCC<sup>13</sup>CN の存在量は HC<sup>13</sup>CCN, H<sup>13</sup>CCCN に比べて、1.4 倍多いことを見出し た<sup>4</sup>。HC<sup>13</sup>CCN と H<sup>13</sup>CCCN の存在量にほぼ同じであった。これは、イオン・分子反応では説明 し難く、反応(1)により進行していることを示唆する。すなわち CN 基における<sup>13</sup>C の濃縮がアセ チレンとの反応でもそのまま維持されている。HC<sub>5</sub>N における観測は信号対雑音比が悪く、確定 していないが、CN 基の<sup>13</sup>C 種が強い傾向は認められる。この場合は CN + HC<sub>4</sub>H(ジアセチレ ン)の反応で HC<sub>4</sub>N が生成している。一方、もしイオン・分子反応で HC<sub>5</sub>N が生成しているので あれば、HC<sub>5</sub>NH<sup>+</sup>の存在量は検出できるほど高いと考えられ、探査を行ったが検出できなかった。

以上の様に、HC<sub>n</sub>Nの生成は大部分、中性・中性分子反応による事を示唆するが、n=1の場 合は図1に示されるように、準安定状態の HNC が多く、イオン・分子反応が主であると考えな ければならないだろう。ではなぜ n=1 とそれ以外で大きな違いが生じるのであろうか。

定量的な議論のためには、同位体種の分別化がどこで起こっているかを確認する必要がある。 そのため我々は<sup>13</sup>CN ラジカルの観測を行った。ところが核スピン・不対電子の相互作用から生 じる超微細構造のスペクトル線強度が、理論的に予想される強度と大きく異なって観測された。 これは水素分子との衝突断面積が超微細構造準位間で異なっているためと考えられる。

## 【低温下の分子衝突】

星間分子の純回転遷移として放射されるエネルギーは多数存在している水素分子(雲の密度に よっては電子)との衝突によって得られる。密度が低い(~1 x 10<sup>5</sup> cm<sup>-3</sup>)星間空間では回転準 位間は必ずしも熱平衡になっていないので、観測スペクトル線強度を理解するためには、分子雲 からの Escape Probability を考慮した励起計算が必要である。その場合、最も大きな不確定さは水 素分子との衝突断面積である。それらは温度依存性を持ち、低温での値を実験的に求めることが 難しいので、多くは理論計算から導かれる。通常、衝突相手を He と仮定して、(星間空間では パラ水素が大部分である。) Potential energy surface を計算し、各運動エネルギー温度で衝突断面 積が求められる。H2と CO の衝突の場合、20%以上の信頼性があると言われているが、大きな分 子に対しては、より大きな誤差を覚悟しなければならないだろう。最近、De Luciaのグループ

(Columbus)は2-80Kの温度範囲でスペクトル線の圧力幅の測定を可能にして、理論計算との 相互比較ができるようになってきた。H2CO分子のK-型二重項遷移(111-110, 212-211 それぞれ 5 GHz, 14 GHz) が H<sub>2</sub>密度 1 x 10<sup>5</sup> cm<sup>-3</sup> の場合、吸収線として観測される事を説明することに成功 している。一方ΔJ=1の通常の遷移は発光として観測されるので、熱平衡が成立していないことを 意味する。それゆえこの計算は表1のC2v対称性分子におけるオルソ・パラ存在量比を求める場 合にも必須である。その比は分子の生成機構について、貴重な情報を与える。イオン・分子反応 で生成する場合は、特別な場合(cvclic-C<sub>4</sub>H,分子が3より小さいO/P比を持つ等)を除いて、統 計的値3となる。分子がダスト(グレイン)の固相から生成する場合、ダストの温度に依存する 比を持つと考えられる。H2CO型の分子では、K=0とK=1のエネルギー差が15Kに相当するた め、ダストの温度が10K程度だと、オルソ・パラ比が2程度になる。表1でH2CSの比が3より 小さな値となっている。これまで TMC-1 のような低温の雲では分子がダストから離脱する機構 が考えにくかったが、最近、TMC-1の比較的小さな領域で、分子組成が大きく変化しているこ とが見出され、クランプ(分子雲の中の小さな塊)同士の衝突により、MHD 波が生じ、ダスト からの分子離脱に関係しているのではとの提案がなされている<sup>5</sup>。ダスト起源のH<sub>2</sub>CSであれば、 0/P 比は小さくなり観測と一致するが、H<sub>2</sub>CO の場合との違いは何かなど問題が残っている。

表 1.	暗黒星雲 TMC-1 でのオルソ	•	パラ存在量比

H <sub>2</sub> CO	$2.8\pm0.7$
H <sub>2</sub> CS	$1.8 \pm 0.3$
H <sub>2</sub> CCO	3
cyclic-C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	$2.4 \pm 0.2$
H <sub>2</sub> CCC	$3.3 \pm 0.6$
H <sub>2</sub> CCCC	$3.3 \pm 1.1$

文献

1. K. Kawaguchi, S. Takano, M. Ohishi, S. Ishikawa, K. Miyazawa, et al., ApJ, 396, L49(1992)

2. K. Fukuzawa, and Y. Osamura, ApJ, 489, 113 (1997)

- 3. N. Balucani, O. Asvany, L. C. L. Huang, Y. Lee, R. I. Kaiser, Y. Osamura, et al., ApJ, 545, 892 (2000)
- 4. S. Takano et al. A&A, 329, 1156(1998)
- 5. J. E. Dickens, W. D. Langer, & T. Velusary, ApJ, 558, 693 (2001)