

H₂O⁺ イオンのオルト-パラ変換の放射寿命

(交通大應化・九大院理・シカゴ大化学天文) ○田中桂一、原田賢介、岡武史

Radiative Lifetime for Nuclear Spin Conversion of Water-Ion, H₂O⁺

(N. Chiao Tung Univ., Kyushu Univ., Univ. of Chicago)

○Keiichi Tanaka, Kensuke Harada, and Takeshi Oka

Last year we reported the *ortho* and *para* coupling channels of H₂O⁺ below 900 cm⁻¹ caused by accidental near degeneracy of rotational levels. For example, hyperfine components of the 4_{2,2}(*o*) and 3_{3,0}(*p*) levels mix each other by 1.2×10^{-3} due to the near degeneracy ($\Delta E = 0.417$ cm⁻¹), but the lower lying 1_{0,1}(*p*) and 1_{1,1}(*o*) levels mix only by 8.9×10^{-5} because of their large separation ($\Delta E = 16.27$ cm⁻¹). In the present study, we solved the radiative rate equations including all the rotational levels below 890 cm⁻¹ to give the *o-p* conversion lifetime to be 0.451, 3.27, 398 and 910 years for the equilibrium *o/p* ratio of 3.00, 3.00, 4.52, and 406 when the radiation temperature T_r is 100, 60, 20 and 5 K. These results qualitatively help to understand the observed high *o/p* ratio of 4.8 ± 0.5 ($T_s \approx 21$ K) toward Sgr B2, but they are too slow to compete with the reaction by collision unless the number of density of H₂ in the region is very low ($n \approx 1$ cm⁻³) or the radiative temperature is very high ($T_r > 40$ K).

<序論> 最近の Herschel 宇宙望遠鏡の観測により、希薄分子雲で H₂O⁺ イオンのオルト(*o*)-パラ(*p*)比が高温近似の *o/p*=3 ではなく 4.8 ± 0.5 の異常な値を示す事が報告された。これはパラからオルトへの変換が生じている事を示している。¹⁾

H₂O⁺ ラジカルの核スピン変換をもたらすのは、電子スピン **S** と核スピン **I** の磁気的な相互作用 T_{ab} ($S_a \Delta I_b + S_b \Delta I_a$) である。理論計算によると相互作用項の大きさ T_{ab} は 72 MHz であり、閉核の分子で核スピン変換をもたらす核スピン-回転相互作用に比べて、4桁近く大きく、H₂O⁺のオルト-パラ変換の確率は7桁以上も大きい。^{2,3)}

既報の分子定数を用いてオルト(*o*)-パラ(*p*) 変換の経路を求めた (図 1 赤線)。有効な経路は十数あるが、偶然の縮重により近接した準位間で、特に大きな変換が生じる。例えば、300 cm⁻¹ 付近の回転準位 3₃₀(*p*) と 4₂₂(*o*) ($F=2.5$) は極めて接近し(0.4422 cm⁻¹) $\alpha = 1.2 \times 10^{-3}$ の割合で混合する。このために 3₃₀(*p*)から 3₁₃(*o*)の各 *F*-成分への自然放出の寿命は、21日から12年と極めて短い。しかし、基底状態に近い 1₀₁(*p*,+)と 1₁₁(*o*,+) は 16.267 cm⁻¹ と離れているために混合の割合は $\alpha = 8.8 \times 10^{-5}$ に過ぎない。従って、1₀₁(*p*,+) の $F=0.5$ と 1.5 から 0₀₀(*o*,-) の $F=1.5$ への自然放出 (図 1 矢印)の寿命は 520 年および 5190 年と長い。^{2,3)}

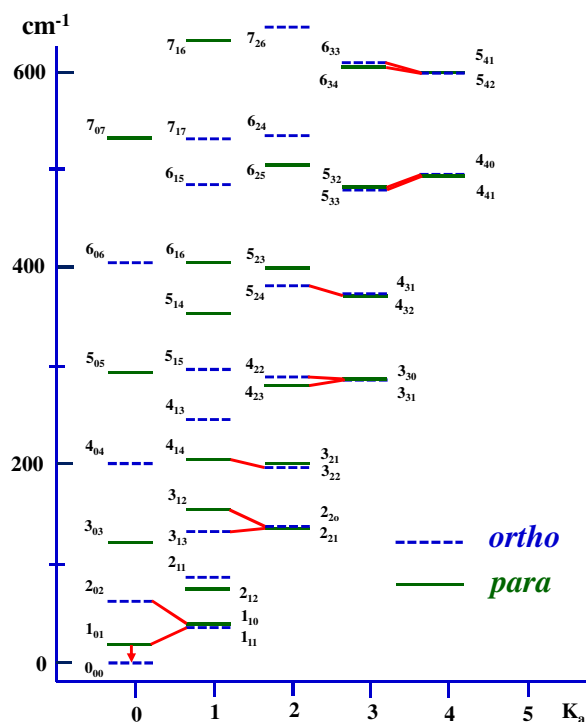


図 1. H₂O⁺ の *o-p* 変換の経路

< オルト-パラ 変換の放射寿命の計算 >

本研究では、 890 cm^{-1} 以下の全ての回転準位間の放射過程（自然放出および誘導吸収、放出）の速度方程式を、平衡にある放射の温度 T_r の関数として計算した。

H_2O^+ は星間空間では、 $\text{OH}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}$ の反応により大きな余剰エネルギーを持って生成するが、双極子遷移の放射寿命は極めて短く（数秒～数分）、短時間で緩和してパラとオルトの各々で放射と平衡に達する。そこから更に緩やかにオルト-パラ変換が生じる。その寿命は放射温度 T_r が 100、60 K の時は早い変換経路を経由して 0.451、3.27 年と早いですが、低い放射温度 20、5 K では 398、910 年と急に遅くなる（図 2）。

平衡に達した後のオルト-パラ比を図 3 に示す。破線は全分子での o/p 比を、実線は最低準位 $0_{00}(o)$ と $1_{01}(p)$ の分布数の比を表わす、Herschel の観測は後者に対応する。 $T_r = 100、60\text{ K}$ では o/p 比は高温の値（3.0 と ~ 1.0 ）となるが、低温 20、5 K では両者が重なり、大きな値 4.52、406 を示す。これは低温では最低準位 $0_{00}(o)$ と $1_{01}(p)$ に分布が集中しその間で $o-p$ 変換が生じるからである。

< 希薄分子雲での o/p 変換 >

希薄分子雲は背景放射 2.7 K と平衡にあり、また全水素 (H/H_2) の粒子密度 ($n \approx 10\text{-}100\text{ cm}^{-3}$) の数%が H_2 分子 ($n \approx 1\text{-}10\text{ cm}^{-3}$) である。 H_2O^+ は H_2 とのイオン分子反応； $\text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}$ により消滅する。ランジュバン過程を仮定すると、この反応の速度定数は $k_L = 6.4 \times 10^{-6}\text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ であり H_2 の並進速度に依らない。1 cm^3 中に 1 個の H_2 分子があるとき $\tau = 49.5$ 年に一回の割合で衝突が起き H_2O^+ が消滅する。

H_2O^+ のオルト-パラ変換は、 o/p 間の放射過程と、 H_2/H との分子衝突による消滅過程との競争反応である。図 2 に示す様に、放射温度が 30 K より低くなると消滅過程が優位になり、到達する o/p 比は図 3 の値から大きく低下する。オルト-パラの生成比を高温近似の 3:1 と仮定すると、消滅の寿命 τ が 50 年、放射温度が 3-20 K の時に、 o/p 比は生成比に近い値 3.15-3.10 を取る。また、消滅寿命 τ が 500 年で、放射温度が 3-10 K の時に、 o/p 比は 4.83-4.47、20 K の時は 3.76 と見積もられ、低密度かつ極低温の条件では Herschel で観測された o/p 比 4.8 を再現する。しかし、これはランジュバン過程を仮定すると H_2 の密度が $\sim 0.1\text{ cm}^{-3}$ に対応し、希薄分子雲で期待される密度 ($n \approx 1\text{-}10\text{ cm}^{-3}$) に比べて一桁以上低い。

文献：1) A&A. 521, L11 (2010). 2) 本会. L10, (2012). 3) J. Phys. Chem. A in press (2013).

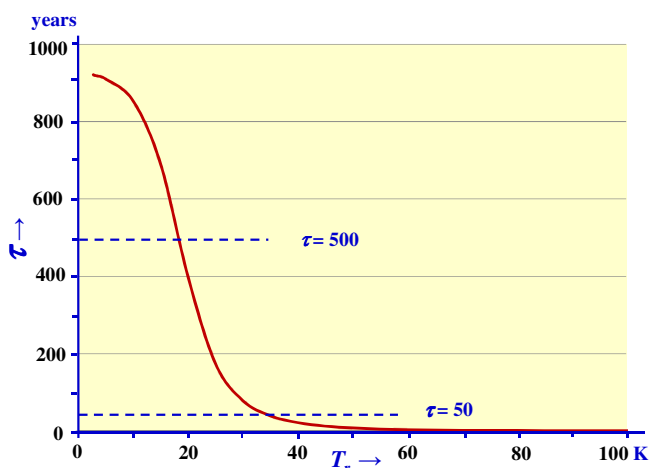


図 2. オルト-パラ変換の放射寿命

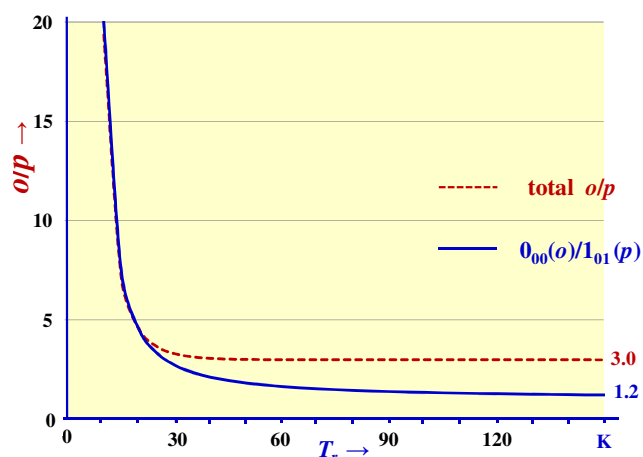


図 3. 放射過程によるオルト-パラ比