

Q23c 多環芳香族炭化水素と水素原子の反応メカニズム

福澄孝博, 田地川浩人 (北大院工)

多環式芳香族炭化水素 (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons ; PAHs) は、数個 数十個程度のベンゼン環から構成される炭化水素有機化合物の総称であり、宇宙空間に存在する炭素種の 20 パーセント以上が PAHs の形をとると言われている。1996 年に南極で発見された隕石中にも存在し、宇宙における生命の起源に関連があると考えられている。PAHs の関与する反応の中で、最も単純な反応は、宇宙に多量に存在する水素原子との反応である。本研究は、密度汎関数理論計算により、多環芳香族炭化水素と水素原子の反応メカニズムを理論的に解明した。また比較のため、プロトンと PAHs との系も計算した。計算により、水素原子は PAHs のエッジ部分のみならず、面内の炭素原子にも発熱的に結合し、強い C-H 結合を生成することを見出した。また、PAHs の吸収スペクトルは、水素原子が付加することにより、近赤外領域に大きくシフトすることを理論的に予測した。