

Q28a 第一原理計算による星間氷表面への原子の吸着エネルギーの推定 2：分子雲化学組成への影響

下西隆 (東北大学), 中谷直輝 (首都大学東京), 古家健次 (筑波大学), 羽馬哲也 (北海道大学)

分子雲コアをはじめとする高密度かつ低温の領域では、ダスト表面における氷の生成が天体の化学進化において支配的な役割を果たすことが知られている。氷ダスト表面における原子・分子の吸着エネルギーは、ダスト表面反応による分子生成を記述する上で極めて重要なパラメータの一つである。従来、星間化学の理論モデルにおける吸着エネルギーは、原子の分極率に基づく大まかな推定値が使用されていた。しかし、近年の実験技術の進歩により水氷表面での酸素原子の吸着エネルギーの測定が正確に行われた結果、従来使用していた吸着エネルギーの値が実験値と大きく異なることが示唆された。これはダスト表面反応による分子の生成効率に大きな影響をもたらす。一方、酸素原子以外の重元素については、現状では実験的アプローチが難しく、窒素原子については実験が1例のみ、炭素原子については未だ実験例が報告されていない。そこで我々は、量子化学計算を応用した高精度の第一原理計算を行うことで、計算的手法により分子雲内でアバンドンスの高い重元素の吸着エネルギーの推定を行った。量子化学計算の手法及び結果の詳細については、本年会において中谷らにより報告される。本講演では、量子化学計算により得られた非晶質水氷表面における炭素、窒素、酸素の吸着エネルギーの値を、化学反応ネットワーク計算に基づく高密度分子雲の化学進化モデルに適用し、これらが天文学的タイムスケールで分子雲の化学組成に与える影響を調査した結果について報告する。新たな吸着エネルギーを用いた化学進化計算では、特に窒素系分子の存在比が従来のモデルと比べて著しい違いを示しており、反応経路の詳細解析は水素原子の拡散による表面反応だけでなく、窒素原子の表面拡散による化学反応も重要な役割を果たすことを示唆している。