

P121c 星間塵表面における P、S、Cl の吸着エネルギーの系統的評価

江刺拓哉, 中谷直輝 (東京都立大学)

P、S、Cl 原子を含む分子種の星間空間での化学進化についてはよく知られていない。一方で、P、S 原子は生命に不可欠な 6 元素の 1 つであり、生命の起源を探る上で重要である。また、Cl 原子は宇宙空間における存在量が少ないにも関わらず、塩素含有分子の存在量が H₂O や CH の存在量に匹敵しており、その濃集過程に興味を持たれている。分子の化学進化において重要となる付加反応は、星間塵と呼ばれる鉱物と非晶質な氷からなる微粒子の表面へ原子・分子が吸着することで進行すると考えられている。しかし、星間空間はもとより、星間塵表面における P、S、Cl 原子の動態についてはほとんど分かっていない。したがって、理論計算によるシミュレーションが強力な研究ツールとなり得る。こうした理論計算に用いられるパラメータは、これまで観測結果に合うように決められてきたが、近年、量子化学計算による吸着・拡散・反応パラメータの系統的な評価が行われ、物理的に意味のあるシミュレーションが可能になってきている。そこで本研究では、組成比シミュレーションを実行することを目的として、P、S、Cl 原子のアモルファス氷表面への吸着エネルギーを量子化学計算により系統的に予測した。水 20 分子からなる氷クラスターモデルを使って求めた P、S、Cl 原子の吸着エネルギーは、それぞれ 960K、2344K、5076K となった。吸着エネルギーの大きさと表面の水分子との最近接距離から、P 原子は氷表面へ物理吸着、S、Cl 原子は化学吸着すると結論付けた。特に Cl 原子では、Cl 原子と水分子の H 原子との間で化学結合を形成し、HCl 分子が生成していると考えられる。このことは、宇宙空間における HCl 分子の存在量の起源を説明し得る結果として興味深い。