

P122b 星間塵表面におけるメタノールの反応性脱離に関する理論的研究

湖口龍一, 中谷直輝 (東京都立大学)

真空中では付加反応による反応熱を吸収できる物質が周囲に存在しないため、星間分子雲中の低密度領域では複雑な分子が生成しづらい。しかし、このような領域においても天文観測によってメタノールを含む複雑な分子が発見されている。メタノールは“もっとも単純な複雑有機分子”と呼ばれており、星間塵表面上でのメタノール生成・脱離反応の解明は星間分子雲における化学進化、特に複雑有機分子の分子進化メカニズムの究明に大きな意味を持つ。星間空間中のメタノール分子は、星間塵表面上の反応により生成すると考えられるが、星形成初期の極低温の環境下ではメタノール分子が星間塵表面から昇華によって脱離することはない。したがって、星間塵表面上の付加反応で生じた反応熱の一部が吸着分子の脱離に利用されるという反応性脱離機構が提案されている。本研究では、氷表面で生成するメタノールの反応性脱離現象の分子論的メカニズムの解明を目的とし、非晶質氷表面に吸着した CH_3O 及び CH_2OH への水素原子衝突の反応過程を第一原理分子動力学シミュレーションにより追跡した。水分子 20 個からなる氷クラスター (Shimonishi et al. 2018) を使った計算より、 CH_3O と CH_2OH 両方への水素原子衝突で、生成したメタノール分子が氷クラスターから脱離するトラジェクトリが観測された。 CH_3O と水素原子の衝突トラジェクトリにおいて、衝突後約 200 fs から、急速に熱が氷クラスターへ伝わる様子が見られた。メタノール分子の酸素原子と氷表面の水分子との間で水素結合を形成しており、これが急劇な熱伝導に寄与するとともに、水素結合を介した運動エネルギーの反跳によって脱離すると考えられる。これは、星間塵表面と水素結合を形成するような極性分子の脱離機構として重要な意味をもつ。一方で、 CH_2OH と水素原子衝突のトラジェクトリでは脱離機構が異なっており、本講演ではこれらを比較し、相違点を議論する予定である。