

Nuclear quantum effects in HCl dissociation dynamics on interstellar ice surface

埼玉大院・理工¹, 上智大・理工²

○荻野加暖¹, 村上龍大^{1,2}, 高柳 敏幸¹

星間分子雲中には氷で覆われた星間塵が存在することが知られている。また星間空間は非常に希薄な空間であり、化学反応が起きるためにはそのサイトとなるような分子の表面が重要だと考えられている[1]。そこで我々はこの星間塵表面に極性分子が衝突した際どのような反応が起こるのかについて興味を持った。

我々は星間塵表面のモデルとして水分子8個のクラスター[2]を用意し、そこにHClを温度に従って衝突させるシミュレーションを行った。星間空間は低温であるので核の量子効果が強く働くという予想のもと、これを確かめるために ring polymer molecular dynamics(RPMD)法を利用した。クラスターとHClの重心間距離は10Å、温度は250Kという条件の下でRPMDとclassical MDのシミュレーションを100トラジェクトリーずつ行い、結果を比較した。

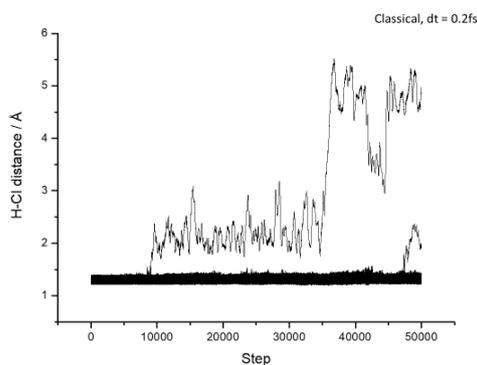


Fig.1 Classical MD シミュレーションで得られた
トラジェクトリーでの H-Cl の距離

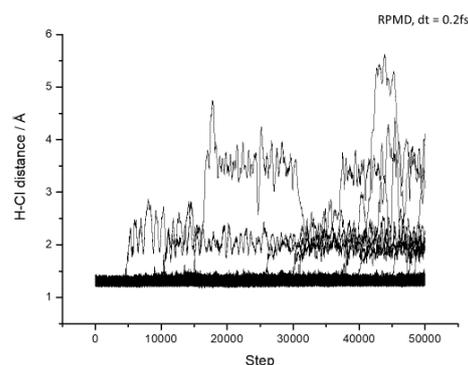


Fig.2 RPMD シミュレーションで得られた
トラジェクトリーでの H-Cl の距離

Fig1,2をみるとRPMDがClassical MDよりもHClが解離するトラジェクトリーが多いことが分かる。これはRPMD法を利用したことにより水素のトンネリング効果を考慮できるようになり、解離しやすくなったと考えている。

詳細は当日発表する。

参考文献

[1] Aoki, M.; N. Hara and T. Ikeda-Fukazawa; *Surf. Sci.*, 2019, 684, 58-61.

[2] Shields, R. M.; Temelso, B.; Archer, K. A.; Morrell, T. E.; Shields, G. C., *J. Phys. Chem. A*, 2010, 114, 11725–11737.