

星間塵表面における化学進化に関する理論的研究

Theoretical studies of chemical evolution on the interstellar dust surface

東京都立大学 中谷直輝

naokin@tmu.ac.jp

宇宙空間には、原子や分子のガスと星間塵と呼ばれる鉱物と氷の微粒子からなる星間分子雲と呼ばれる領域が存在し、星形成の初期段階として重要な研究対象となっている。星間分子雲では、主成分である水素原子(H)や水素分子(H₂)のほかに、メタンやホルムアルデヒドをはじめとして100種類以上の分子が観測されており、生命の起源を探るといった観点からも大きな興味注がられている。こうした分子の生成には、原子同士の付加反応が起こる必要があるが、10⁻¹³~10⁻¹⁷気圧という極めて希薄な条件では、反応熱のリザーバーがないため付加反応が起こらない。そのため、星間空間に存在する星間塵表面での化学反応が分子の進化に重要な役割を果たすと考えられている。しかしながら、10K~100Kという極低温下で数百年~数万年かけて起こる化学反応を実験的に追跡することは難しく、計算科学的なアプローチが必要不可欠である。

これまでの天文学分野では、低温実験の結果や経験的なパラメータを利用したシミュレーションの結果が天文観測の結果を説明できるか否かによって計算の妥当性を評価しており、分子科学的な解析や考察は不可能であった。本研究では、量子化学計算に基づいて半経験的ないし非経験的な分子パラメータを算出、あるいは第一原理シミュレーションを行うことで、星間塵表面で起こる化学反応の系統的な解析と分子論的メカニズムの解明を目的として研究を行った。

新潟大学・下西らと共同して行ったC, N, O原子の氷表面への吸着エネルギーの計算[1]では、N, O原子の低温実験から得られる吸着エネルギーを半定量的に再現するとともに、実験が困難なC原子の吸着エネルギーについて14,100K (= 28 kcal/mol)と予測し、氷表面に化学吸着することを示した(Fig. 1)。さらに、これらのパラメータを利用して速度方程式法に基づく組成比シミュレーションを行った結果、吸着エネルギーが400Kと小さいN原子の氷表面における拡散が顕著になり、N₂分子の生成比が従来法よりも増加し、観測結果の傾向をより良く説明することに成功した。また、C原子が氷表面に化学吸着するという結果から、その後のC化学種の化学進化過程を追跡し、メタンとメタノールが生成する新たな反応経路を見出した。この経路は、メタンの生成が優位に進行すると考えられるWCCC天体においても、氷表面上でメタノールが生成する可能性があることを示すものであり、興味深い結果である。

このように、量子化学計算に基づく原子・分子の吸着・拡散パラメータの算出や、分子進化の反応経路の解析は、これまで天文学分野に欠如していた「分子科学の視点」を取り入れることを可能にし、地上実験や天文観測だけでは知り得ない、化学進化の分子論的メカニズムの解明に大きな役割を果たすと期待される。

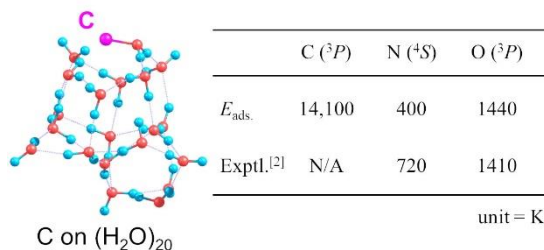


Fig. 1 Calculation model and adsorption energies.

[1] T. Shimonishi, N. Nakatani, K. Furuya, T. Hama, *The Astrophysical J.*, **855**, 27 (2018).

[2] M. Minissale, E. Congiu, F. Dulieu, *Astronomy & Astrophysics*, **585**, A146 (2016).