

# H<sup>-</sup> + C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> → H<sub>2</sub> + C<sub>2</sub>H<sup>-</sup>の反応ダイナミクスにおける核の量子効果

<sup>1</sup>埼玉大院理工, <sup>2</sup>上智大理工

村上龍大<sup>1,2</sup>, ○飯田龍聖<sup>1</sup>, 橋本ゆう<sup>1</sup>, 高橋章将<sup>1</sup>, 高橋颯真<sup>1</sup>, 高柳敏幸<sup>1</sup>

星形成の分野において C<sub>6</sub>H<sup>-</sup>が分光的に検出されて以来, C<sub>4</sub>H<sup>-</sup>をはじめとして幾つかの星間物質分子アニオンが実験的に同定されている[1-2]. しかし, 星間空間での分子アニオンの生成メカニズムの詳細は十分には解明されていない. その要因の一つとして, 実験室において分子アニオンを十分な濃度で生成することが難しいために[3], 分子アニオンの生成に関連する化学反応の反応速度定数の実験値が十分に得られていないことが挙げられる. このため, 理論計算によって星間空間のような極低温領域も含めた広い温度領域の反応速度定数を予測することは, 分子アニオンの生成機構を解明する上で重要であると考えられる.

C<sub>2</sub>H<sup>-</sup>は最も小さい分子アニオンのひとつであり, 星間中に観測されていないが, C<sub>8</sub>H<sup>-</sup>のなどの, より大きい分子アニオンの星間中における生成モデルに含まれているであろうと推測されている[4]. 特に, H<sup>-</sup> + C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> → H<sub>2</sub> + C<sub>2</sub>H<sup>-</sup>反応はいくつかある C<sub>2</sub>H<sup>-</sup>生成反応の中でも重要なもののひとつとされている[3]. だが, 実験では室温条件での反応速度定数[5]が得られているものの, 低温領域については我々の知る限りでは測定がない.

本研究では, H<sup>-</sup> + C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> → H<sub>2</sub> + C<sub>2</sub>H<sup>-</sup>反応について, GRRM プログラムと MSA2 プログラム[6]を利用して精度の高いポテンシャル曲面を作成し, 古典動力学法と経路積分理論に基づくPIMD/RPMD法による半古典動力学法の両手法で衝突シミュレーションを行い, 反応速度定数を複数の温度条件で計算した.

得られた反応速度定数を温度に対してプロットしたものが Fig. 1 である. 300K において, PIMD/RPMD 法の方がより実験値に近い値が得られた. また, このときの反応断面積は比較的大きい値で, かつ温度が小さいほど大きな値となることから, この反応では量子効果が重要な役割を果たしていると推測される. 詳細は当日発表する.

## 【参考文献】

- [1] J. Cernicharo, M. Guélin, M. Agúndez, K. Kawaguchi, M. C. McCarthy, P. Thaddeus, *Astron. Astrophys.*, **467** (2007) L37–L40.
- [2] S. Brünken, H. Gupta, C. A. Gottlieb, M. C. McCarthy, P. Thaddeus, *Astrophys. J.*, **664** (2007) L43–L46.
- [3] T. J. Millar, C. Walsh, T. A. Field, *Chem. Rev.*, **117** (2017) 1765–1795.
- [4] M. A. Cordiner, T. J. Millar, *Astrophys. J.*, **697** (2009) 68–78.
- [5] O. Martinez Jr, Z. Yang, N. J. Demarais, T. P. Snow, V. M. Bierbaum, *Astrophys. J.*, **720** (2010) 173–177
- [6] A. Nandi, C. Qu, J. M. Bowman, *J. Chem. Theory Comput.*, **15** (2019) 2826–2835.

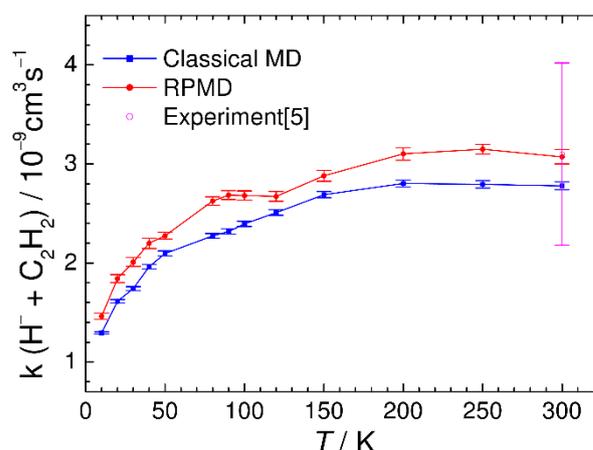


Fig.1 The thermal rate coefficients  $k(T)$  as a function of temperature