

$\text{H}_3^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3\text{OH}_2^+ / 2\text{H}_2 + \text{H}_2\text{COH}^+$ 反応の 分岐過程の解離メカニズム

¹ 埼玉大院理工, ² 上智大理工

村上龍大^{1,2}, ○高橋颯真¹, 荻野加暖¹, 太田陽己¹, 岡田邦宏², 高柳敏幸¹

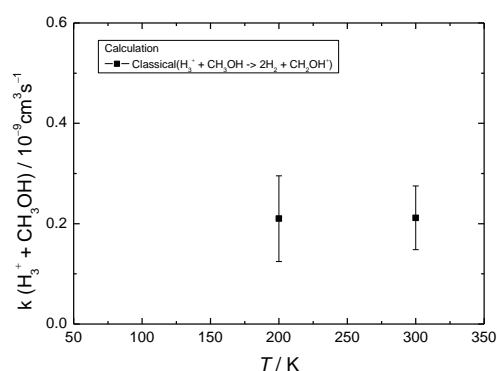
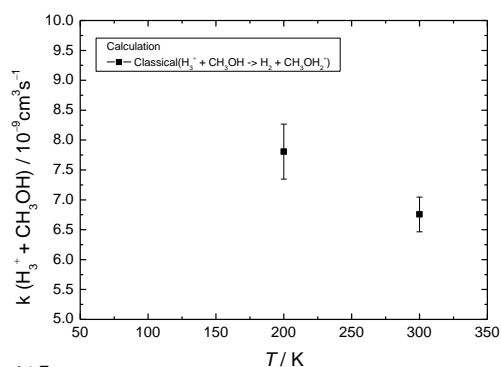
プロトン供与体として働く H_3^+ は、星間物質中に非常に多く存在するイオンである。[1,2]したがって、中性分子へのプロトンの移動は、プロトン親和力による大きな过剩エネルギーを伴う反応であるため、星間化学において重要である。[3,4]

中性分子であるメタノール(CH_3OH)は、星間水中に豊富に存在し[5-7]、より複雑な有機分子の主な供給源であると考えられている[8,9]。プロトン化されたメタノール(CH_3OH_2^+)は、 $\text{H}_3^+ + \text{CH}_3\text{OH}$ 反応によって生成されると考えられているが、この反応にはもう一つの経路があり、それは 2H_2 とプロトン化ホルムアルデヒド(H_2COH^+)が生成する反応である。先行研究ではこの H_2COH^+ が生成される反応として、 $\text{H}_3^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow 2\text{H}_2 + \text{H}_2\text{COH}^+$ 反応があると指摘している[10]。

本研究では、 $\text{H}_3^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3\text{OH}_2^+ / 2\text{H}_2 + \text{H}_2\text{COH}^+$ 反応について機械学習を用いてポテンシャルエネルギー曲面を作成し、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するとともに、対象の二種の生成物それぞれの解離メカニズムの解析をしている。

得られた古典動力学法での2つの温度の反応速度定数は二種類の生成物で大きく差があった。それぞれが最終生成物となるかは現在調査中である。

詳細は当日報告する。



【参考文献】

- [1] D. R. Flower *et al*, *Astron. Astrophys.* **2005**, 436, 933.
- [2] D. R. Flower *et al*, *Astron. Astrophys.* **2006**, 449, 621
- [3] S. G. Lias *et al*, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1984**, 13, 695.
- [4] E. P. L. Hunter *et al*, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1998**, 27, 413.
- [5] E. Dartois *et al*, *Astron. Astrophys.* **1999**, 342, 32.
- [6] R. T. Garrod *et al*, *Astrophys. J.* **2011**, 735, 15.
- [7] D. C. Whittet *et al*, *Astrophys. J.* **2011**, 742, 28.
- [8] J. C. Laas *et al*, *Astrophys. J.* **2011**, 728, 71.
- [9] A. Canosa *Proc. Int. Astron. Union* **2019**, 15, 35.
- [10] M. Ohishi *et al*, *Astrophys. J.* **1996**, 471, L61.