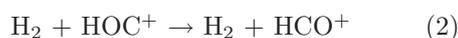


光解離領域における HOC^+ 生成ダイナミクス

(首都大院・理工) ○山本 純一

1 序論

星間空間に存在する低温の分子雲の周りには、紫外線によって分子を励起・解離させる領域が存在し、光解離領域 (Photo-Dissociation Region:PDR) と呼ばれ、この領域における化学反応は、分子雲とは異なると考えられている。最近、M82 の PDR の電波による観測結果が報告され [1]、分子雲で通常 1000-6000[2] となる存在比 $[\text{HCO}^+]/[\text{HOC}^+]$ が約 44 と推定された。これは他に比べかなり小さく、分子雲における HCO^+ と HOC^+ の主要な生成反応



では、 HCO^+ が大量に生成されるため、小さい存在比 $[\text{HCO}^+]/[\text{HOC}^+]$ を説明できない。 HOC^+ を生成する他の反応としては、以下の反応が研究されている。[2]



反応 (1)、(3) と (4) が生成する HCO^+ と HOC^+ の比率は、実験的に図 2 のような分岐比で起こることが示唆されている。[3][4]

本研究では、 HOC^+ を生成する反応として反応 (3) を取り上げ、高橋、高柳らが HNC に対して用いた手法 [5] を用いて、 HOC^+ の生成を確認する。

2 計算手法

MP2/6-311++G(d,p) 及び B3LYP/6-311++G(d,p) で構造最適化を行い、安定構造と遷移状態のエネルギー及びポテンシャルエネルギー面を CCSD(T)/6-311++G(d,p) と比較した後、BOMD による分子動力学計算を行った。

O^+ と H_2O の重心間距離を 4\AA とし、 H_2O をランダムに回転した構造を初期構造として用いた。分子雲付近の PDR 領域を考慮して温度は 10K とし、初期運動エネルギーは与えなかった。この条件の下で、ポテンシャルエネルギーの計算に B3LYP/6-311++G(d,p) を使用し、BOMD を 500 ステップ分計算した。これらの計算には、GAUSSIAN03 パッケージを使用した。

図 1 $[\text{HCO}^+]/[\text{HOC}^+]$ 存在比の観測に基づいた推定値

Source	$[\text{HCO}^+]/[\text{HOC}^+]$
SgrB2(OH)	360
DR21(OH)	2600
G34.3	4000
L134N	4500
NGC 2024	900
NGC 7538	3500
Orion (3N,1E)	2000
Orion KL	2100
W3(OH)	6000
W51M	1300
M82	44

図 2 各反応の HCO^+ と HOC^+ の生成比

Reactant	HCO^+	HOC^+
$\text{H}_3^+ + \text{CO}$	94%	6%
$\text{C}^+ + \text{H}_2\text{O}$	16%	84%
$\text{CO}^+ + \text{H}_2$	52%	48%

3 計算結果

現在、142 トrajекトリの計算は完了しており、生成物とそのトrajекトリ数は図3のように得られている。500 ステップ以内に何も起きなかった計算については省略してある。反応するものの再び $C^+ + H_2O$ へと戻る反応が 37% あるが、これを除くと HOC^+ の生成が 61% と大部分を占めることから、実験的に予想されていたように BOMD 計算でも $C^+ + H_2O$ 系は HOC^+ を多く生成することが確認できた。 HOC^+ の生成割合は実験から得られた値よりも増加しているが、実験環境を再現したわけではないので定量的に差が出るのは当然といえる。また、星間空間

での存在比を統計的に議論するには、様々な反応を考慮する必要があり、本研究だけの議論は難しい。最後に、 HOC^+ と HCO^+ の生成過程で、代表的な例を表4と表5に示す。

図3 $C^+ + H_2O$ の生成物と生成比

Productant	Traj.	Ratio
$C^+ + H_2O$	53	37.32%
$H + HCO^+$	2	1.41%
$H + HOC^+$	87	61.27%

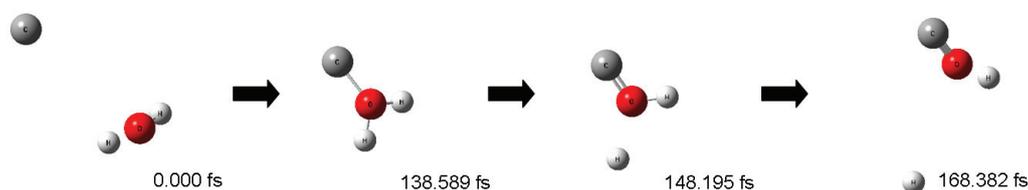


図4 HOC^+ 生成過程の代表例

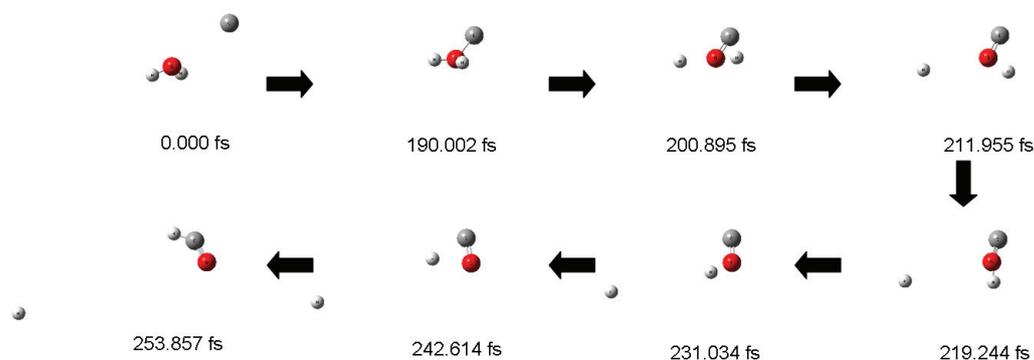


図5 HCO^+ 生成過程の代表例

参考文献

- [1] A. Fuente, et al. *A&Ap*, 492:675–684, 2008.
- [2] A. J. Apponi and L. M. Ziurys. *ApJ*, 481(2):800–808, 1997.
- [3] A. J. Illies, M. F. Jarrold, and M. T. Bowers. *J. Chem. Phys.*, 77(11):5847–5848, 1982.
- [4] J. G. L. Colin G. Freeman, et al. *Int. J. Mass Spectro. and Ion Proc.*, 80:255–271, 1987.
- [5] K. Takahashia and T. Takayanagi. *J. Mol. Struct.: THEOCHEM*, 817(1-3):153–160, 2007.