

4P007

星間空間における NS 分子生成機構の理論研究

(埼玉大院・理工) ○佐藤和宇眞, 吉川武宏, 高柳敏幸

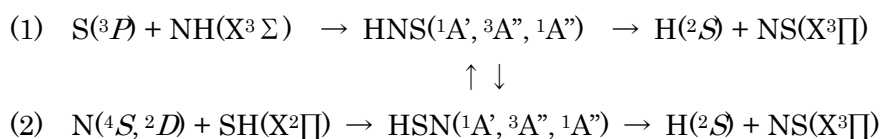
Theoretical study on the formation mechanism of the NS radical molecule in interstellar space

(Saitama Univ.) ○Kazuma Sato, Takehiro Yoshikawa, Toshiyuki Takayanagi

星間空間は低温低密度であるために、地球上ではあまり見られない分子が存在し、これらは星間分子と呼ばれている。これまでに見つかった星間分子は簡単な二原子分子からフラレーン程度の多原子分子まで 160 種類以上あり、その中には S 原子を含む分子が 1 割ほど存在する。

S 原子を含む最も簡単な星間分子の 1 つに NS ラジカル分子がある。NS(X³Π) は 1975 年に射手座星雲で Gottlieb らによって初めて発見され^[1] その後も様々な分子雲で観測されているが、どのように生成したのか未だによくわかっていない。そこで我々は星間分子がどのように S 原子を取り入れているかについて興味を持ち、研究の出発点として NS ラジカルの生成機構についての理論研究を行った。

反応系には最も簡単で有力なものとして(HNS)系を取り上げ、以下の反応を理論的に検討した。



これらの反応の詳細を理解するためには(HNS)系の全領域をカバーする高精度なポテンシャルエネルギー曲面が必要となる。本研究では基底状態 ¹A' にエネルギーの近い第 1 励起状態 ³A''、第 2 励起状態 ¹A'' までを考慮した。ポテンシャルエネルギーの計算は MRCI+Q/aug-cc-pVXZ(X = D, T, Q) レベルで行い、CBS(Complete Basis Set)法で外挿して基底関数依存性を排除した。それらの計算値を元にして Aguado らが開発したプログラム^[2] を使用することによりグローバルなポテンシャルエネルギー曲面の関数を作成した。分子軌道は状態平均 CASSCF 計算で求めた。

Fig.1 にポテンシャルエネルギー曲面の概略図を示し、Fig.2 には横軸を ∠H-N-S、縦軸を N-H 間の距離として得たポテンシャルエネルギー曲面図を示した。これらより、全ての反応入口から中間体 HNS/HSN 生成までの経路に反応障壁がないことがわかる。また、NS(X³Π) の生成に関して HNS/HSN の異性化を考慮する必要があることがわかる。¹A' 状態の場合では NS(X³Π) 生成経路の全てに反応障壁がないが、³A'' 状態の HNS 側を経由する経路では NS(X³Π) の生成にわずかな反応障壁が存在するため、HNS/HSN の異性化過程が重要となる。一方、¹A'' 状態の場合では NS(X³Π) 生成経路の全てに反応障壁があるために他の 2 状態に比べて NS(X³Π) の生成に関する寄与は小さいと考えられる。更に、反応(1)では ¹A' と ³A''、反応(2)では ¹A' と ³A'' 状態で反応経路の交差が起きているために経路間の非断熱遷移も考慮する必要がある。

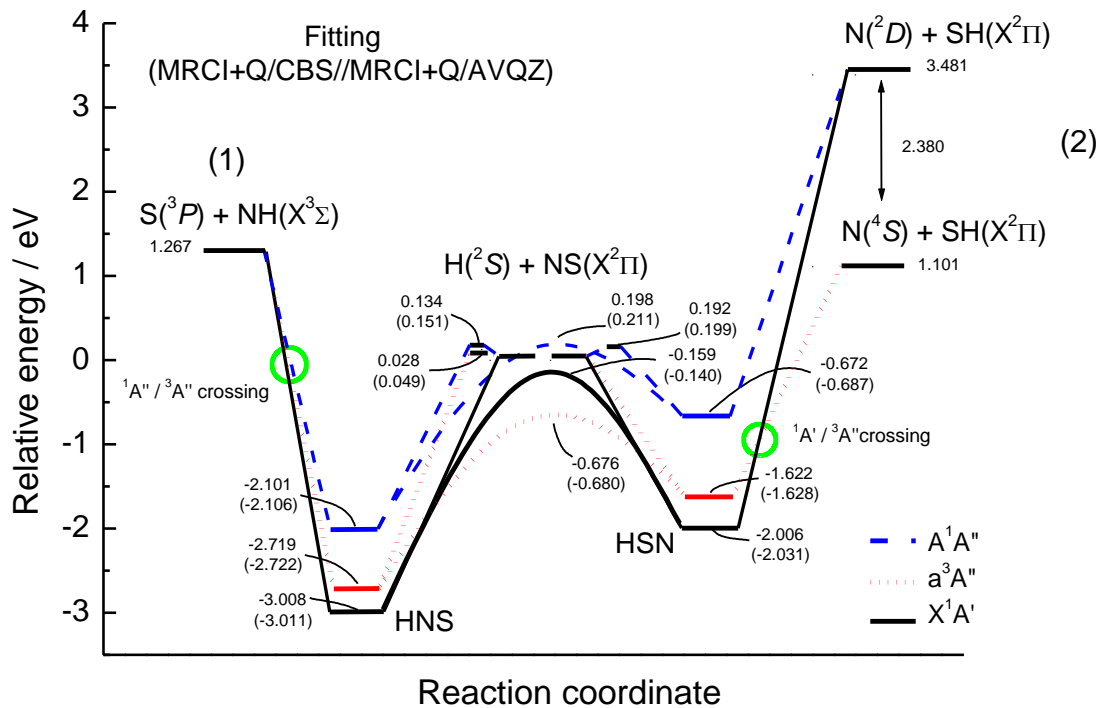


Fig.1 (HNS)系ポテンシャルエネルギー曲面の概略図

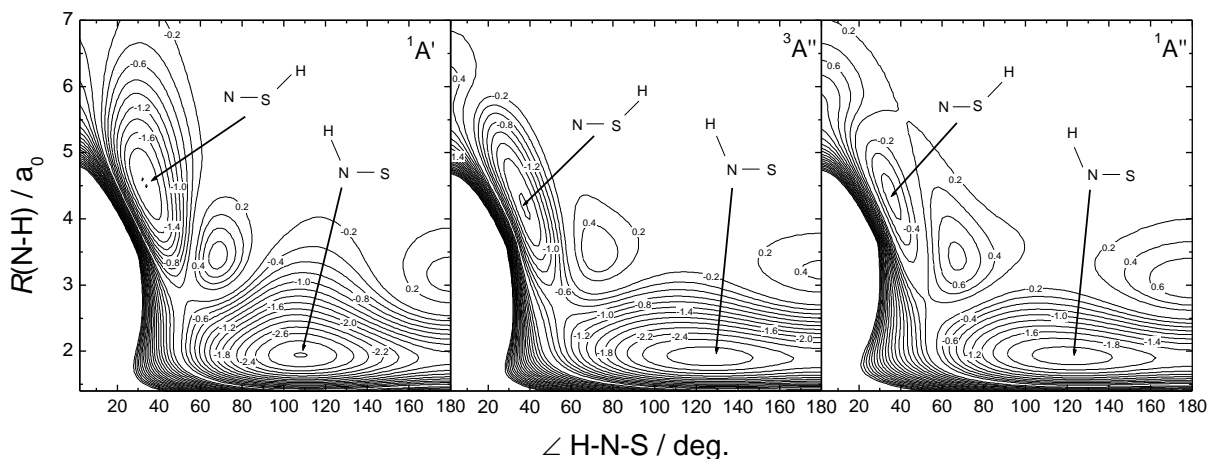


Fig.2 NS(X^3Pi)間距離を各点で最適化した HNS/HSN ポテンシャルエネルギー曲面図

我々はこれらのポテンシャルエネルギー曲面を用いて量子反応散乱計算による動力学計算を行う予定である。詳細は当日発表する。

文献

[1] Gottlieb, C. A. et. al, *Astrophys. J.* 200 (1975) 147.

[2] A. Aguado, C. Tablero, M. Paniagua, *Comput. Phys. Commun.* 108 (1998) 259.