

【序】

星間分子として存在する H_2S は炭素原子 $\text{C}(^3\text{P})$ と反応して、 CS ならびに HCS を生成することが最近になってわかってきた。宇宙には炭素原子とともに炭素鎖分子の素材となる C_2 分子もかなりの量存在すると考えられており、本研究では、 H_2S と C_2 から星間分子として大量に存在する C_2S を生成する可能性を量子化学計算を用いて調べた。そして、その結果を交差分子線の実験で得られたデータと比較した。また、 C_2 と H_2O との反応のポテンシャルエネルギー面との比較も行ない、これらの反応の星間空間における可能性と、生成すると考えられる化学種について考察した。

【理論計算】

反応のポテンシャルエネルギー面を求めるにあたって、密度汎関数法 B3LYP/6-311G(d,p) を用い、エネルギーの計算には CCSD(T)/aug-cc-pVTZ を用いた。相対的エネルギーには、B3LYP 法による零点振動エネルギーを補正した。

【結果と考察】

C_2 の基底状態は $^1\Sigma_g^+$ であり、非常に近接して励起三重項状態 $^3\Pi$ も存在する。Fig.1 には、本理論計算により得られた $\text{H}_2\text{S} + \text{C}_2(^1\Sigma_g^+)$ のポテンシャルエネルギー面を示した。 C_2 と H_2S との間のポテンシャルは引力的であり、途中でエネルギー障壁なしで H_2SCC 中間体(Int1s)をい

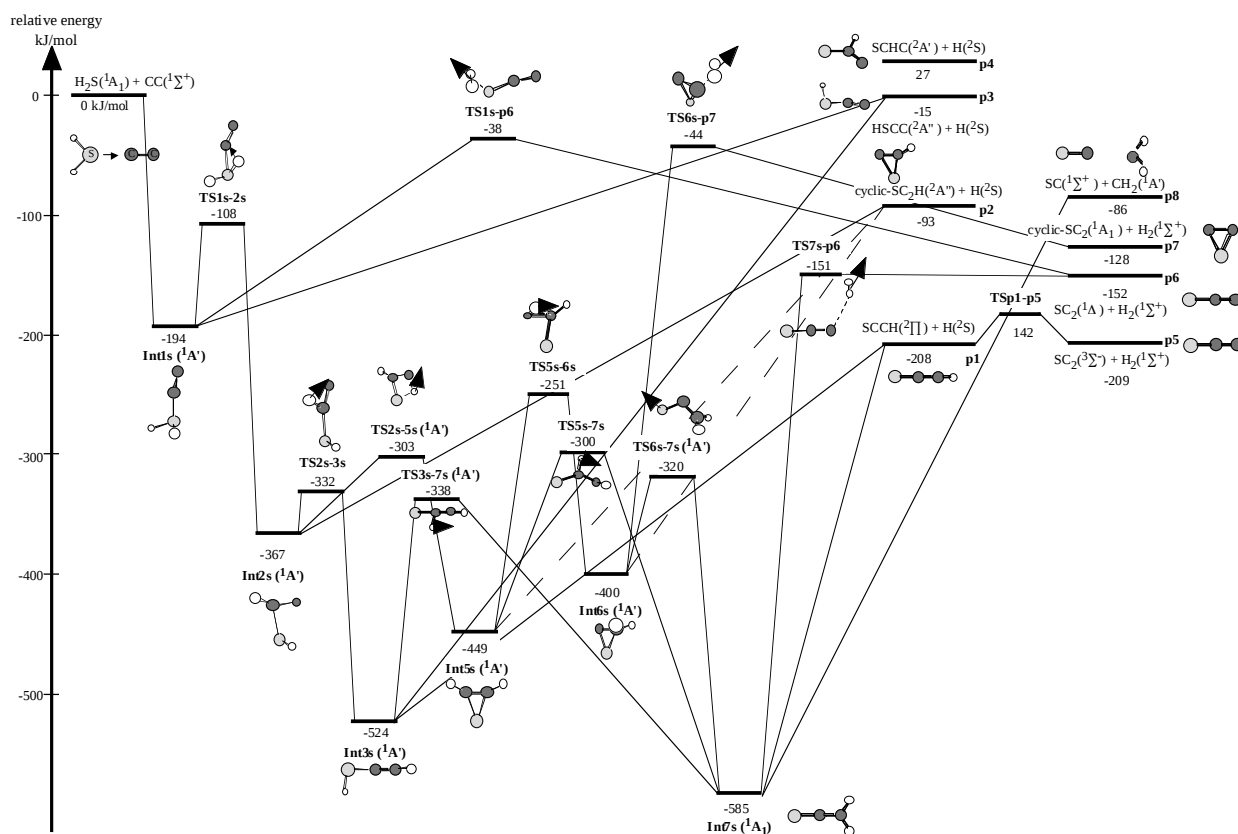


Fig.1 The potential energy surface of the reaction between H_2S and ground-state $\text{C}_2(^1\Sigma_g^+)$.

