

Q44a 宇宙塵表面における H_2 分子生成反応と CO 分子の蒸発機構

高橋 順子 (国立天文台) David A. Williams (University College London)

宇宙塵表面は、星間物質の化学進化過程に重要な役割を果たしている。宇宙で最も大量に存在し、且つ、星間空間中の化学進化を支配する物質である水素分子は、超低温・超低密度の宇宙空間中では気相反応によって生成することが困難であるため、宇宙塵表面上で生成するとされている。宇宙塵表面では、それ以外にも、他の星間分子の生成反応や、気相中の分子の凝固と再蒸発など、さまざまな化学過程が起きていると考えられている。従来、星形成がまだ行われていない暗黒星雲内部では、宇宙塵表面で生成された分子や凝固した分子はそのまま凍結してしまうと言われてきたが、それでは説明のつかない量の分子が気相中にあるため、凍結分子が蒸発する何らかの機構があると考えられる。本研究では、その機構の1つとして、宇宙塵表面上で水素分子が生成される際に生成エネルギーの一部が吸収されて宇宙塵マンツルの局所的な温度上昇が起こることによる、凍結分子の蒸発過程について検討してみた。

H_2O のアモルファス氷の板を宇宙塵マンツルのモデルとし、その表面上で2つの水素原子が反応して水素分子が生成する過程の分子動力学 (MD, Molecular Dynamics) シミュレーションを、10 K の温度下で行った。アモルファス氷上で入射された2つの H 原子が出会った時、 H_2 分子生成熱の一部が氷に吸収されることにより、 H_2 分子が生成できることがわかった。さらに、生成した H_2 分子が氷に吸収された残りの余剰エネルギーの一部を使って氷表面上から直接離脱する機構が明らかにされた。離脱した H_2 分子のほとんど全ては振動励起状態にあった。水素分子生成エネルギー (110 kcal/mol) の大部分は、生成した H_2 分子の振動エネルギー (78.5%)、回転エネルギー (9.9%)、並進エネルギー (7.4%) へ分配され、残りの 4.4 kcal/mol (4.0%) がアモルファス氷へ吸収されることがわかった。

次に、その MD シミュレーションにおいて、 H_2 分子生成点付近での宇宙塵マンツルの局所的な温度上昇の時間変化を解析し、背景温度 10 K に対し、 $R \leq 6 \text{ \AA}$ で約 20 - 30 K まで上昇することがわかった。この結果に基づいて、暗黒星雲内部で宇宙塵表面に凍結した CO 分子が蒸発する臨界温度と、大きな塵及び小さな塵の極限での蒸発効率について考察した。