

Q09c 多環芳香族炭化水素 (PAHs) と複数水素原子の反応メカニズム

福澄孝博, 田地川浩人 (北大院・工)

多環式芳香族炭化水素 (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons ; PAHs) は、数個-数十個程度のベンゼン環から構成される炭化水素有機化合物の総称であり、宇宙空間に存在する炭素種の 20 パーセント以上が PAHs の形をとると言われている。このように大きな有機分子は、宇宙における生命期限への関与や「ぼやけた星間線」(diffuse interstellar band) を引き起こす分子の可能性の観点からも注目されている。PAHs の関与する反応の中で、最も単純な反応は、宇宙に多量に存在する水素原子との反応である。本研究は、密度汎関数理論計算により、多環芳香族炭化水素と水素原子の反応メカニズムを理論的に解明した。既に、水素原子は PAHs のエッジ部分のみならず、面内の炭素原子にも強く結合することが知られている。計算により、2つ目の水素原子も PAHs 面内の炭素原子に発熱的に結合し、新たな C-H 結合を生成することを見出した。2つ目の水素原子が付くサイトにより安定性がどのように違うかも含め、報告する。