いて座 B2(N)領域内のホットコアにおけるアセトアミド生成反応に関する理論研究

（千葉工大工）○河知 春樹・松澤 秀則
Theoretical study of the acetamide formation process in the hot core region of Sgr B2(N)
(*Faculty of Engineering, Chiba Institute of Technology*) ○ Haruki Kawachi, Hidenori Matsuzawa

J.M. Hollis et al. have proposed the formation of acetamide from formamide and methylene in the hot core in the Sgr B2(N) region. The results of previous studies suggest that this reaction proceeds in the excited triplet state or (and) ground singlet state. Then, both reaction pathways were examined. From Fig. 1, it was confirmed that the reaction proceeds mainly in the excited triplet state, emitting light to some intermediates and end products, and then transitioning to the ground singlet state.
Keywords : Sagittarius B2(N); acetamide; density functional theory; formation process; interstellar molecule

J.M. Hollis らによって、いて座 B2(N)領域内のホットコアでホルムアミドとメチレンからアセトアミドが生成する(1)式が提唱された。[1)]

$$NH_2CHO + CH_2 \rightarrow CH_3CONH_2 + h\nu \qquad (1)$$

これまでの研究から、反応は主に励起三重項状態で進行することが示唆されている。しかし詳細な反応経路は未解明で、光放出の過程も不明である。そこで本研究では励起三重項経路をはじめ、中間体での光放出が起こること等をふまえて基底一重項の反応も検討した。中間体(INT)と遷移状態(TS)の構造最適化と IRC 計算は B3LYP 法で、基底関数に aug-cc-pVDZ を用いて行った。図 1 に反応(1)の三重項経路（赤）と一重項経路（青）を示す。三重項経路は、生成物の三重項励起状態(INT5)まで進行可能で、INT5 から最終生成物に至る際に約 370nm の光を放出すると示唆された。また INT1 から INT3 のいずれかの段階で、光放出により基底状態に遷移した場合でも、最終生成物に至ることが可能であった。なお、発表では TD-DFT の結果も示す予定である。

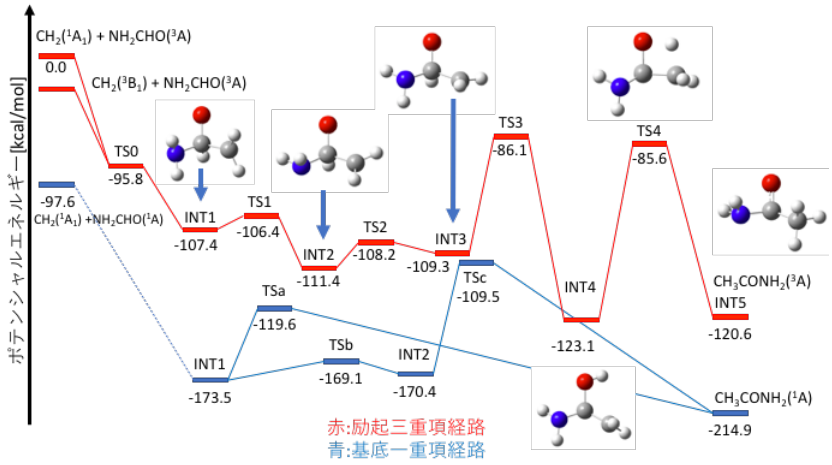

図 1　ホットコア領域におけるアセトアミド生成反応のエネルギーダイアグラム

1) J.M. Hollis, *et al.,* The Astrophysical Journal, **643**, 25-28 (2006)

© The Chemical Society of Japan