

Synthesizing carbon nanotubes in space / On carbon nanotubes in the interstellar medium

Chen, T. and Li, A. (2019), A&A, 631, A54 / Li, Q. et al. (2020), MNRAS, 493, 3054

Theme/Motivation

炭素は宇宙で4番目に豊富な元素であり、炭素がどのような状態で宇宙空間に存在しているのかは興味深い。2010年にはC₆₀, C₇₀が中間赤外線分光観測から同定されている。実験室環境で似たような過程で形成されるcarbon nanotube (CNT)の形成パスおよび観測に与える影響について議論した論文。

論文-1 (Chen & Li, 2019): 第一原理計算によって小さいCNTの合成パスを検証 / 赤外特性を計算

論文-2 (Li et al., 2020): 紫外線の減光曲線に与える影響を議論 / 現実的な合成プロセスを議論

Carbon Nanotube (CNT)

grapheneが丸まった形状をした1次元構造を持つ炭素異性体。

grapheneの巻き方(向き/半径/長さ/端)によってさまざまな構造を持ちうる。

fullereneと同様に真空中で炭素をアーク放電で蒸発させたときに形成された (Iijima, 1991)。

Chen & Li (2019)

比較的サイズの小さいCNT (hydrogenated CNT) が気相反応で形成可能かどうかを第一原理計算で検証した。ベンゼン環をスタートとしてn-フェニル化合物が輪をつくりアセチレンが付加されていく過程を考える。エネルギー的にはこのパスで合成が進んでも問題がないことを確認 (活性化エネルギー等の計算) した。

同じく第一原理計算から今回計算した小さいCNTの振動解析をして赤外線光学特性を導出した。

C-CあるいはC-Hの結合に特徴的な振動数に対応したバンド放射を示すことが期待できる。

ほとんどバンド放射は他の炭素質ダスト (PAHなど) の放射と波長がかぶっているため検出は期待できない。

水素が付加されていないCNTでは5.3 μmにバンド放射を示すかもしれない (JWSTなら検出可能?)。

Li et al. (2020)

CNTが星間物質に存在しているとしたらどの程度の量になるのかを実験値と観測を比較して検証。

合成したCNTの紫外線吸収は4.5, 5.3 eV付近にピークを持つ ⇒ 2175 Å bump キャリアではない。

ここでは視線方向に垂直: 並行 = 2 : 1の比率で混合した紫外線吸収特性を典型的なものとして採用する。

銀河の減光曲線を amorphous silicate (large/small), graphite & PAHs (large/small) とCNTで fitting.

CNTを加えると減光曲線の3.6 μm⁻¹ = 2800 Å付近が excess する ⇒ CNTの存在量に上限を与える。

およその上限値は [C/H]_{CNT} ~ 10 ppm (星間空間中の炭素の3-4%以下)。

Results/Discussion/Comments

赤外線の観測からCNTの存在を探すのであればJWSTで5.3 μm featureをターゲットにするのが良さそう。ただしCNTのスペクトルはサイズや構造に依存する (直径2nm以下でも100種類以上の構造がありうる)。

実験的に様々な種類のCNTを混合した物質の赤外特性を測ることが重要。

星からの放射があればベンゼンからHACAプロセスを経てCNTを合成するためのパスが見つかりつつある。Chen & Li (2019)ではHACAでarmchair-CNTの形成パスを検証したがzigzag-CNT形成の論文も準備中。

実験室では鉄ナノ粒子を触媒として使うことでCNTを合成できることが知られている。

星間空間に存在するはずの鉄元素のうち90%以上の行方がわかっていないことを考えると興味深い過程。

CNTを観測的に捉えることで間接的にも鉄ナノ粒子の存在を示せるとインパクトはありそう。

Fig. 1

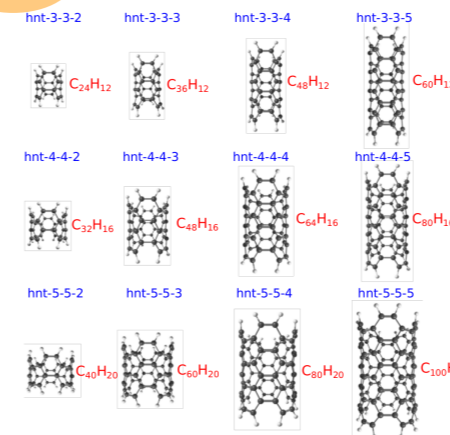


Fig. 1: hydrogenated carbon nanotube の例

Fig. 2

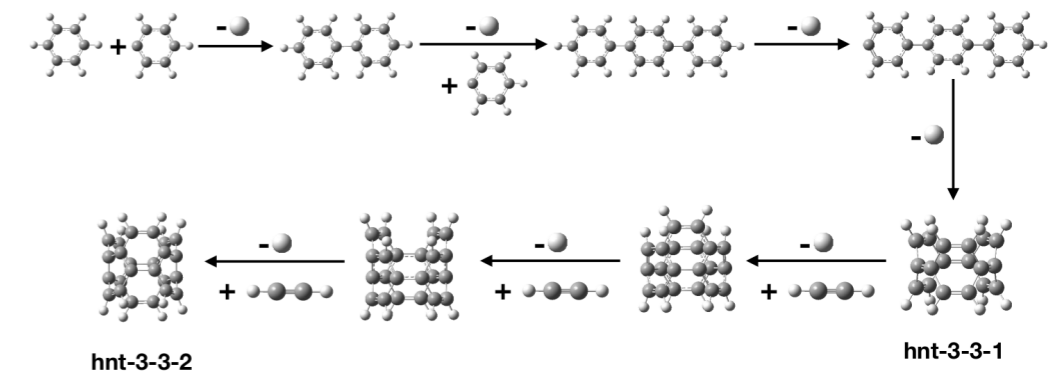


Fig. 2: CNT形成プロセス (HACA; hydrogen-abstraction/acetylene-addition) の模式図

Fig. 3

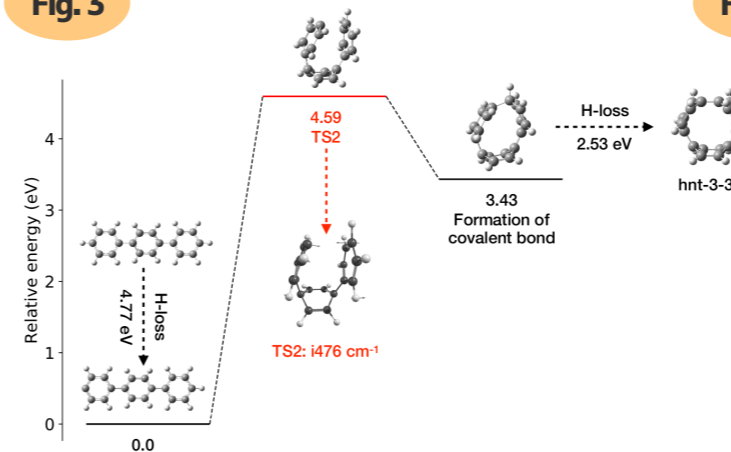


Fig. 3: 反応経路 (活性化エネルギー) の例

Fig. 4

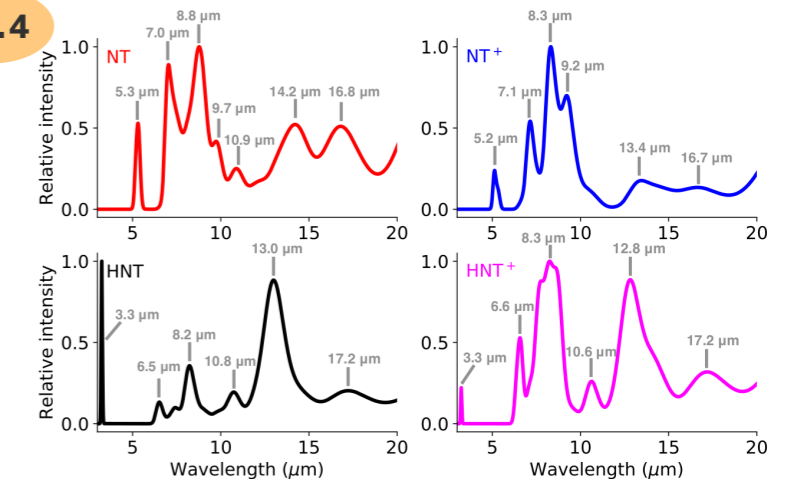


Fig. 4: 第一原理計算から導出したCNT, HNTの赤外線光学特性

Fig. 5

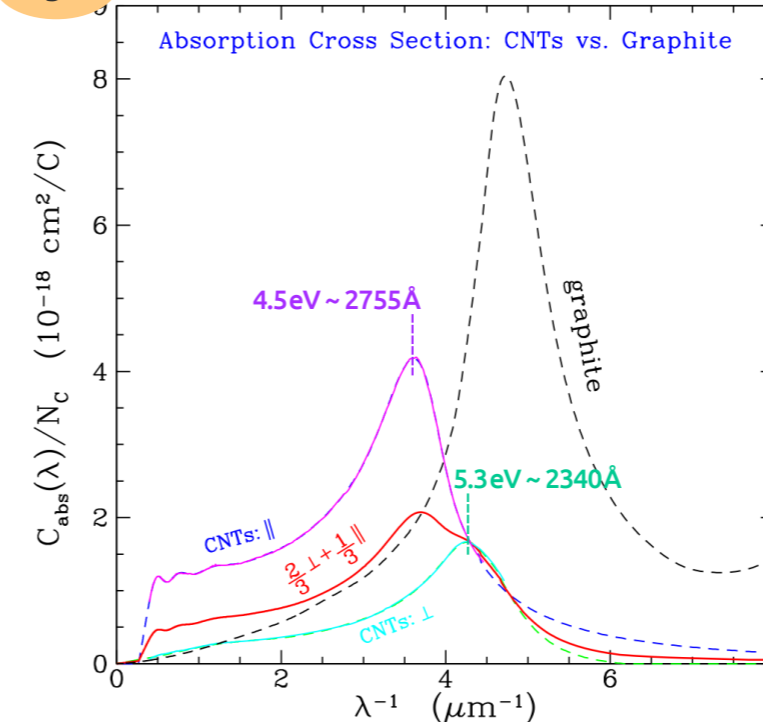


Fig. 5: graphiteとCNTの紫外線吸収特性の比較

Fig. 6

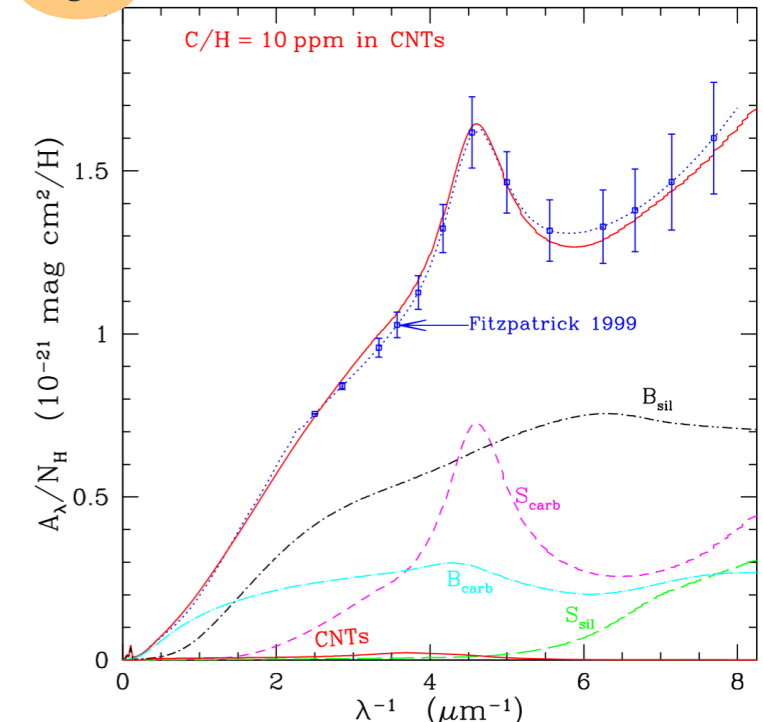


Fig. 6: 銀河の減光曲線とCNTの寄与の上限値 (C/H = 10 ppm)