

**AZ IMINOACETONITRIL IZOMEREK EGYMÁSBA ALAKULÁSÁNAK VIZSGÁLATA
HIDROGÉNEZÉSI/DEHIDROGÉNEZÉSI KATALITIKUS CIKLUSOKON KERESZTÜL****Balbisi Mirjam^{a,b}, Csonka István Pál^b, Tarczay György^{a,b}**^aEötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Molekulaspektroszkópai Laboratórium, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A^bMTA-ELTE Lendület Laboratóriumi Asztrokémia Kutatócsoport, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A

A csillagközi térben napjainkig már több mint 200 molekulát azonosítottak, viszont ezeknek az anyagoknak a keletkezésével kapcsolatban még számos megválaszolatlan kérdés van: többek között a csillagközi tér leggyakoribb anyagának, a H₂-nek a csillagközi térben tapasztalt óriási keletkezési sebességét sem tudják megmagyarázni kielégítően a modellek.

A Z-HNCHCN-t 2019 elején azonosították csillagközi térben [1]. A mérések szerint a Z- és a már korábban kimutatott E-HNCHCN izomerek aránya $[Z/E] = (6,1 \pm 2,4)$. Ez jó egyezést mutat a termodinamikai egyensúllyal a gázfelhő kinetikus hőmérsékletén, de a két izomer között a közvetlen izomerizáció nem lehetséges a nagy aktiválási energia miatt. Feltételezésünk szerint a két HNCHCN izomer H-atomokkal történő hidrogénezési/dehidrogénezési reakciókon keresztül alakulhat át egymásba. Ezek a katalitikus ciklusok nemcsak a két izomer mennyisége közti összefüggést magyarázhatják meg, hanem a H₂ keletkezéséhez is hozzájárulhatnak. Célunk volt bebizonyítani, hogy csillagközi térben lejátszódhatnak ezek a katalitikus ciklusok.

A munka során a feltételezett reakciók kiindulási és végtermékeire, valamint az átmeneti állapotokra végeztünk harmonikus frekvenciaszámítást. A számítások igazolták, hogy ezek a folyamatok vagy gát nélkül mennek, vagy nagyon kis aktiválási energiát igényelnek.

A katalitikus ciklusok kísérleti megfigyelése céljából csoportunk egy külföldi laboratóriumban végzett méréseket *p*-H₂ mátrixizolációs technikát alkalmazva. A HNCHCN-t egy korábbi cikkben leírt módon, az N₃CH₂CN UV-fotolízisével állítottuk elő *p*-H₂-mátrixban [2]. Ilyenkor 4 termék keletkezését tapasztaltuk, melyeket Z- és E-HNCHCN-ként, valamint Z- és E-HNCHNC-ként azonosítottunk.

A hidrogénezési reakciók modellezéséhez *in situ* H-atomokat állítottunk elő a mátrixban. Ennek hatására egy új anyag, az NCHCN gyök keletkezett és a két HNCHCN izomer arányának megváltozását tapasztaltuk. Ez arra utal, hogy az NCHCN-t és a HNCHCN izomereket összekötő katalitikus ciklusok teremthetik meg a keresett kapcsolatot a két iminoacetonitril izomer között.

- [1] V. M. Rivilla, J. Martín-Pintado, I. Jiménez-Serra, S. Zeng, S. Martín, J. Armijos-Abendaño, M. A. Requena-Torres, R. Aladro, D. Riquelme; *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters*, **2019** (483) 114-119.
- [2] P. Lorencak, G. Raabe, J. J. Radziszewski, C. Wentrup; *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*, **1986** (96) 916-918.