

A metil-amin adszorpciójának vizsgálata amorf jég felületén a világűr körülményei között, nagykanonikus Monte Carlo módszerrel

Horváth Réka¹, Hantal György², Sylvain Picaud³, Szőri Milán⁴, Jedlovsky Pál⁵

¹ELTE Apáczai Csere János Gyakorlógimnázium

²Fizika Intézet, Bécsi Egyetem

³UTINAM Intézet (CNRS UMR 6213), Université Bourgogne Franche-Comté

⁴Kémiai Intézet, Miskolci Egyetem

⁵Kémia Tanszék, Eszterházy Károly Egyetem

A metil-amin potenciális prekursora a glicinnek, mivel CO₂-dal való reakciója jég vagy folyékony víz felületén glicint eredményez. Egyes feltételezések a kémiai evolúció folyamán — ami a fehérjék és a nukleinsavak megjelenése előtti időszak — keletkezett glicint részben vagy teljesen ezen reakció eredményének tulajdonítják. Ismert továbbá az is, hogy mind a metil-amin, mind a CO₂ jelen vannak a csillagközi térben. Emellett számos, a világűrből érkezett meteorit felületén detektálták a glicint is. *Ab initio* számítások megmutatták, hogy a vizes felületek katalizálják a fent említett reakciót, mi több, azt találták, hogy a reakció végbemenetelének a hőmérséklet csökkenése kedvez. Az egyetlen körülmény, ami akadályozhatja ennek lejátszódását a csillagközi térben, a reaktánsok rendkívül alacsony koncentrációja. Kutatási célunk az volt, hogy megvizsgáljuk annak a lehetőségét, hogy a metil-amin koncentrációja lokálisan megnövekszik az amorf jég felületén történő adszorpció által alacsony, részben a kozmikus térre jellemző hőmérsékleten (200-20K), ezzel lehetővé téve, hogy a folyamat számottevő sebességgel menjen végbe. Vizsgálataink során kizárólag számítógépes szimulációs módszerekkel dolgoztunk.

Az eredményeink megmutatták, hogy a metil-amin erős adszorpció hajlammal rendelkezik az amorf jég felületén: több molekuláris rétegben is adszorbeál, s amint az várható, az adszorpció intenzitása egyre nő a hőmérséklet csökkenésével. Szintén megállapítható, hogy a metil-amin kicsi, ám még detektálható koncentrációban a jég tömbfázis belsejébe is behatol. A számításaink alapján kapott adszorpció izotermák - eltekintve a beoldódott molekulák okozta különbségtől - viszonylag jól illeszthetők Langmuir-féle izotermával. Az illesztett izotermák meredeksége nagyon hirtelen emelkedik, ami arra enged következtetni, hogy tekintélyes felületi sűrűséget tapasztalhatunk már nagyon kis, a világűrre jellemző nyomás mellett is (10⁻²⁵-10⁻³⁰ Pa) 20K-en. Ezek alapján úgy találtuk, hogy a csillagközi térben e reakció kellő sebességgel végbemehet jeges felületeken.

Emellett vizsgáltuk az első adszorpció rétegben található metil-amin molekulák orientációját, illetve a kötési energia járulékait. Az eredményeinkből arra következtettünk, hogy a metil-amin molekulák a jégfelületen lévő vízmolekulákkal jellemzően három hidrogén kötést alakítanak ki a világűrre jellemző alacsony kémiai potenciálon, azaz alacsony nyomáson.