

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

Horváth Réka<sup>a</sup>, Hantal György<sup>b</sup>, Sylvain Picaud<sup>c</sup>, Szóri Milán<sup>d</sup>, Jedlovsky Pál<sup>e,\*</sup>

<sup>1</sup>ELTE Apáczai Csere János Gyakorlógimnázium, Papnövelde u. 4. H-1053 Budapest, Magyarország

<sup>2</sup>Fizika Intézet, Bécsi Egyetem, Boltzmanngasse 5, A-1090 Bécs, Ausztria

<sup>3</sup>UTINAM Intézet (CNRS UMR 6213), Université Bourgogne Franche-Comté, 16 route de Gray, F-25030 Besançon, Franciaország

<sup>4</sup>Institute of Chemistry, University of Miskolc, Egyetemváros A/2, H-3515 Miskolc, Hungary

<sup>5</sup>Department of Chemistry, Eszterházy Károly University, Leányka u. 6, H-3300 Eger, Hungary

A metil-amin potenciális prekursora a glicinnek, mivel CO<sub>2</sub>-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 CO<sub>2</sub> 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 adszorpciós 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 belsejében is behatol. A számításaink alapján kapott adszorpciós 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<sup>-25</sup>-10<sup>-30</sup> Pa) 20K-en. Ezek alapján úgy találtuk, hogy a csillagközi térben e reakció kellő sebességgel végbemehet jeges felületeken.

Emellett vizsgáltuk az első adszorpciós 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.