

P235a 星間ダスト上でのアミノ酸生成の理論的研究

木立佳里, 梅村雅之, 庄司光男, 小松勇, 栢沼愛, 矢花一浩 (筑波大学), 白石賢二 (名古屋大学)

宇宙における化学進化に関しては未だ不明な点も多いが、模擬実験や宇宙観測から、有機物や高分子が星間ダスト表面等で生成されているということが明らかになってきている。観測ではアミノ酸前駆体 (アミノアセトニトリル) がすでに見つかっており (A. Belloche et al. 2008)、ALMA ではアミノ酸の検出も期待されている。また、地球に飛来した隕石からはアミノ酸やアミノ酸前駆体 (ヒダントイン) が検出されている。

しかし、宇宙に存在するアミノ酸やその前駆体の生成機構の詳細は明らかになっていない。本研究では、想定される様々な反応経路の中でも最も一般的だと考えられる生成過程について反応物および中間体の生成エネルギーを評価し、宇宙におけるアミノ酸生成の仕組みを解明する。グリシン及びアラニンが、ヒダントインやアミノニトリルを経由する生成機構に対して高精度な量子化学計算 (密度汎関数法) により検討を行った。また、氷に覆われたダスト表面を想定した水溶液中での反応経路の解析を、Polarizable Continuum Model (PCM) により溶媒効果を考慮して行った。

真空中においては、計算した全ての反応過程の中でグリシンが最も安定であり、過剰に安定な中間体は存在しなかった。アラニンに関しても同様の傾向が見られた。水溶液中においても反応過程の中でグリシンが最も安定であったが、ヒダントインが形成されにくい可能性が示された。そのため、構成要素となる反応物があれば、グリシン及びアラニンは容易に生成しうることが明らかになった。また、遷移状態解析から、水分子が全くない環境ではヒダントイン経由過程は起こりにくいことが明らかになった。