

分子雲中でのグリシン形成についての理論的検討;
・ CH_2COOH 中間体を経由する低温ラジカル反応

筑波大学理工学群物理学類 4年 宇宙理論研究室

越智 聡郎

グリシンとはなにか

アミノ酸



R:

グリシン(Gly) -H (NH₂CH₂COOH)

アラニン(Ala) -CH₃

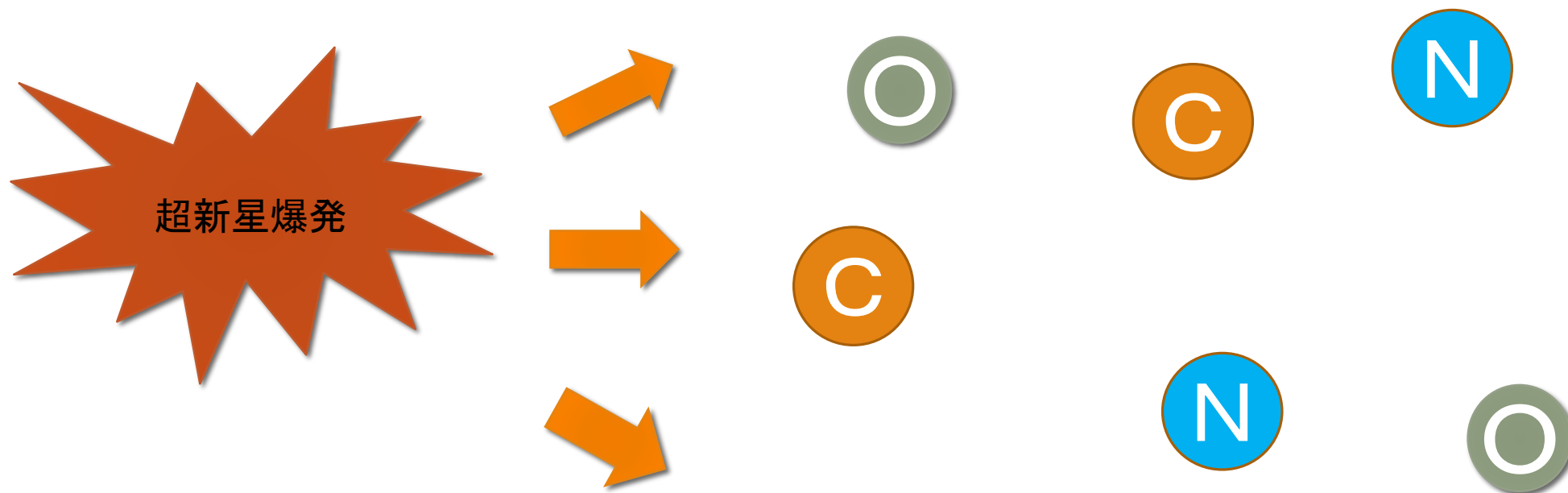
など

- ・アミノ酸はアミノ基とカルボキシル基で脱水縮合しタンパク質(ポリマー)となる
- ・生物の体の至る所に存在

 生命の基本的物質

生命発生までのプロセス(仮説)

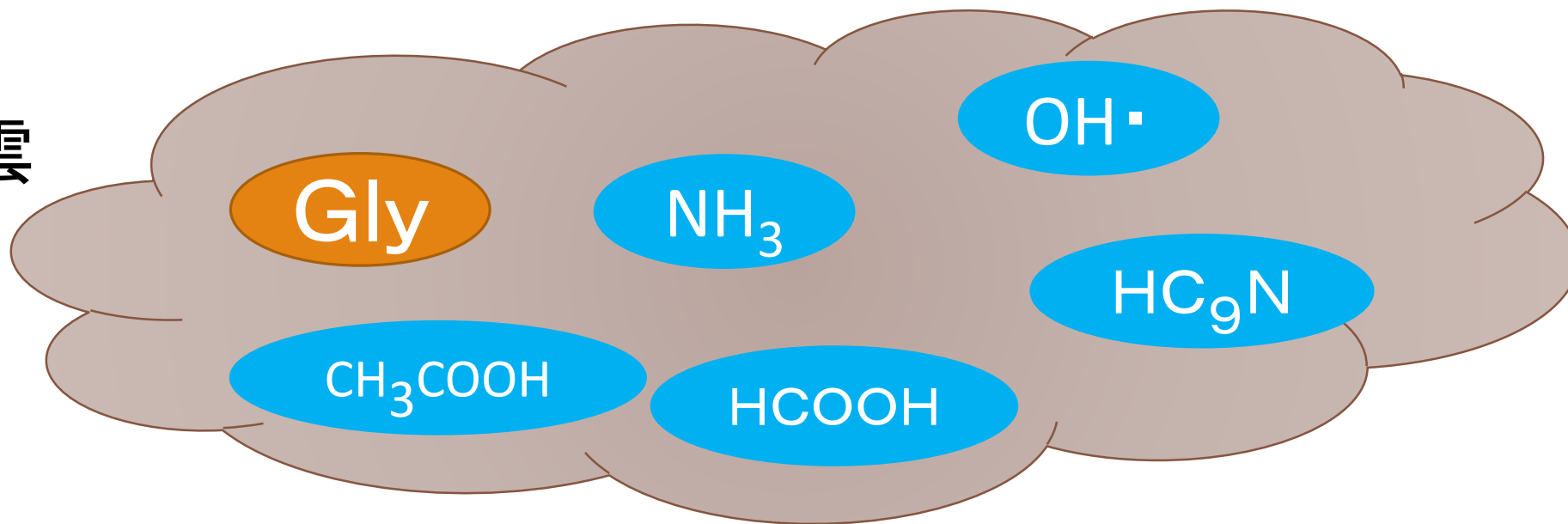
①超新星爆発により炭素や酸素といった重い元素が宇宙空間にまき散らされる



生命発生までのプロセス(仮説)

②分子雲が形成され、分子雲中でグリシン等の分子が生成される

分子雲



生命発生までのプロセス(仮説)

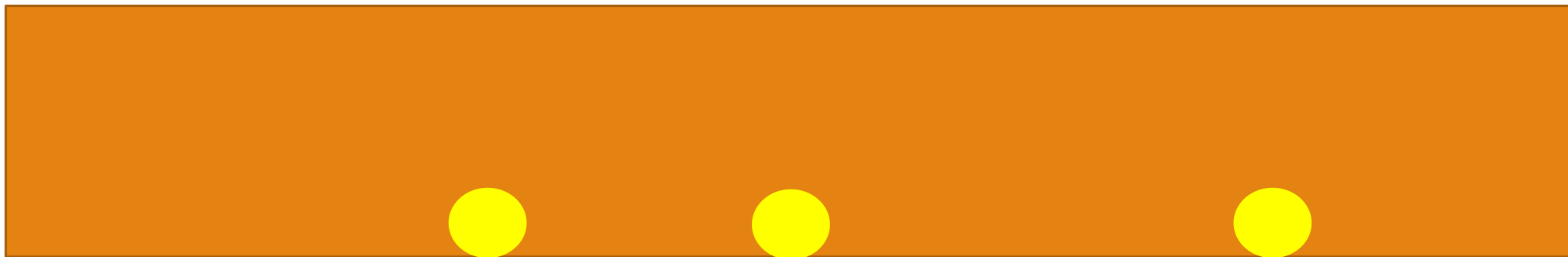
③太陽系が形成され、隕石とともにアミノ酸が地球に運ばれてくる



生命発生までのプロセス(仮説)

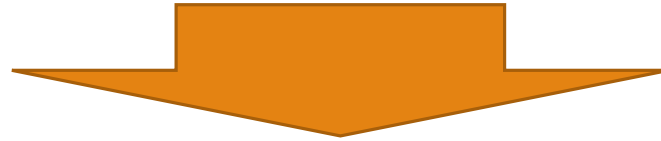
④原始地球で蓄積されたアミノ酸をもとに、最初の生命が誕生する

アミノ酸など有機物のスープ



アミノ酸隕石飛來說

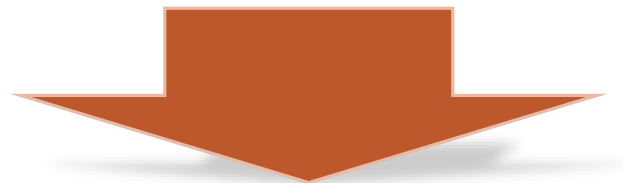
・2009年、NASAの探査機「スターダスト」が彗星「ヴィルド第二彗星」から採取したサンプルの中に、グリシンが含まれていることが確認された。



アミノ酸が隕石によって地球にもたらされた有力な証拠である

分子雲

分子雲は宇宙空間での化学進化の場



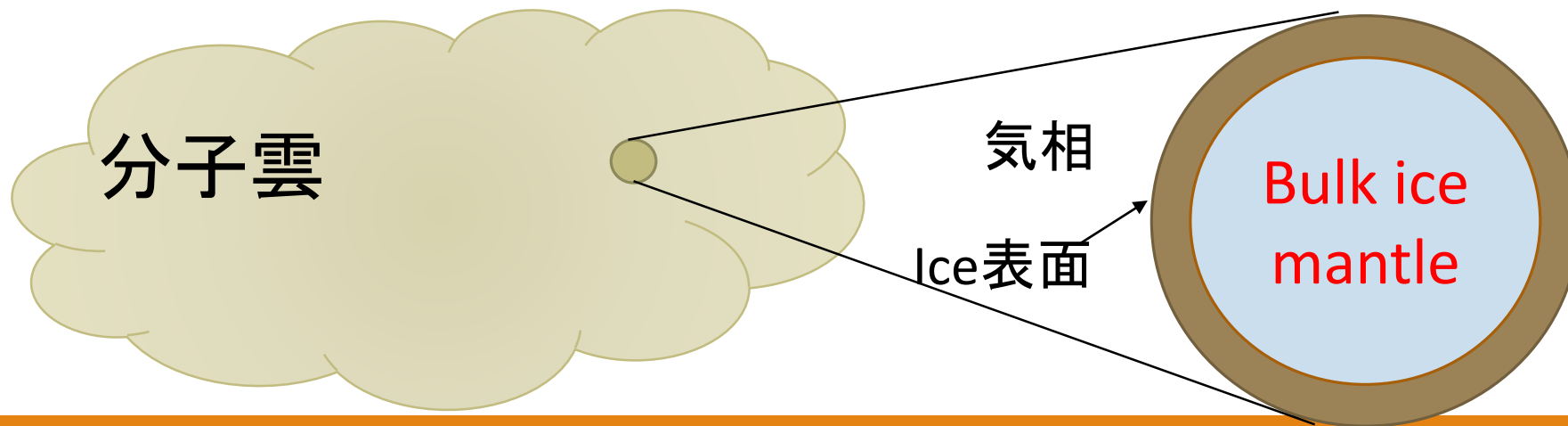
アミノ酸（グリシン、アラニン等）
の存在が期待されている

グリシン前駆体は発見済み

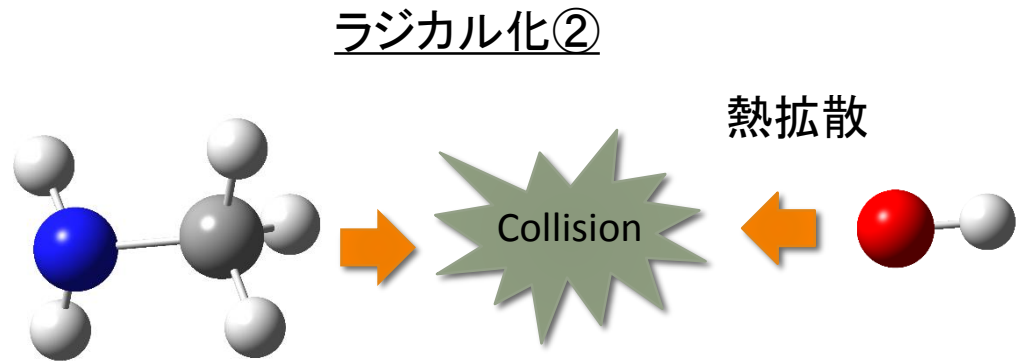
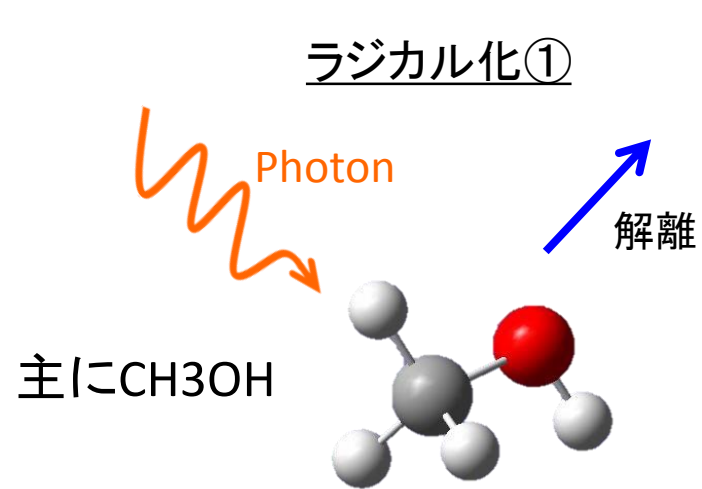
・2014年、国立天文台の研究チームはグリシンの前駆体物質と考えられているメチルアミン(CH_3NH_2)を野辺山45m電波望遠鏡を用いて、複数の星形成領域で検出することに成功した。

Garrodによるグリシン生成モデル

- Robin T. Garrod (2013) “A three phase chemical model of hot cores” *Astrophysical Journal*, 765: 60
- 気相 + ice表面 + bulk ice mantle の3-phaseによるダストのモデル
- グリシン生成反応は主として表面で起こると期待される
- 表面ではラジカル反応が重要(エネルギー供給が少ないため)



光解離反応と衝突によるさまざまなラジカル形成

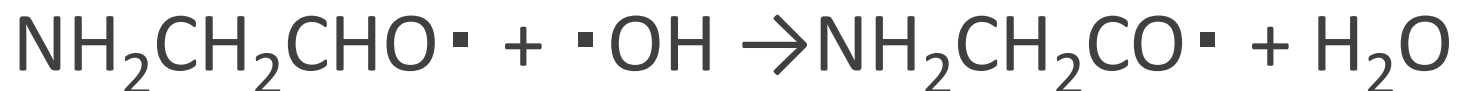


Garrodによるグリシン生成モデル

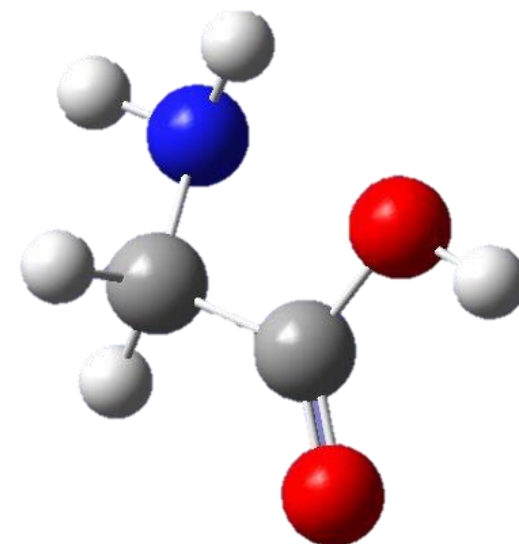
- ・T～40K、55K、75～90Kで異なる反応経路を提示
- ・T～120Kで反応に必要な分子がダスト上から昇華
- ・T～200Kでグリシン昇華

Garrodによるグリシン生成モデル

・T ~ 40K



・T ~ 55K (本研究の反応経路)



Garrodによるグリシン生成モデル

・T～75～90



T = 120K

$\text{NH}_3, \text{HCOOH}, \text{CH}_3\text{COOH}$ などが昇華し、グリシン生成が起きない

目的

- ・生命の基本的物質：アミノ酸

➡ 分子雲では未発見だが今後発見される可能性あり

- ・グリシンが生成できるかが問題となっている

➡ 本当に分子雲中で生成されるかについて検証

目的

- ・本検討ではGarrodの提示したT～55Kでの反応について高精度量子化学計算で検証

- ・T～55K



計算手法

- ・量子化学計算パッケージ「Gaussian09」を使用し、密度汎関数法(DFT)で各反応について反応エネルギーを求める

UB3LYP/6-31G(d)

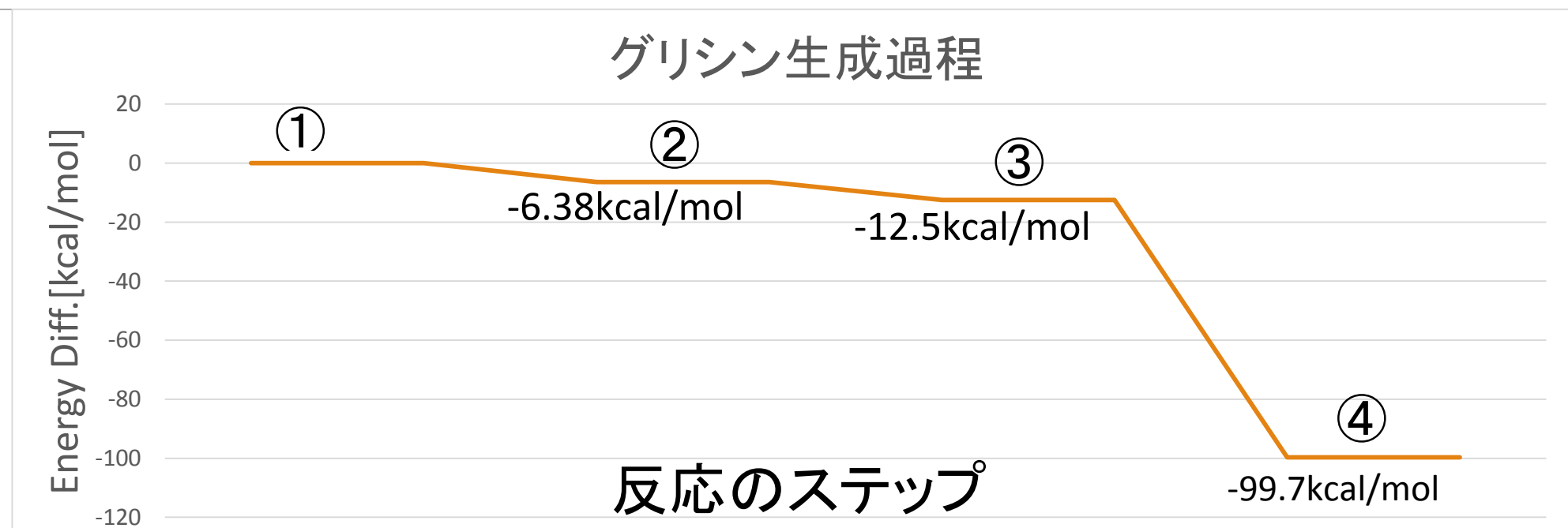
- ・Kohn-Sham 方程式

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta - \sum_A^{N_{\text{atom}}} \frac{Z_A}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_A|} + \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{XC}}{\delta \rho} \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r})$$

Z_A : 原子核Aの電荷

\mathbf{R}_A : 原子核Aの位置 $\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N_{\text{elec}}} |\phi_i(\mathbf{r})|^2$

結果




- ①: $\text{NH}_2^\bullet + \text{CH}_3\text{COOH} + \text{OH}^\bullet + \text{NH}_3$
②: $\text{NH}_2^\bullet + \text{CH}_3\text{COOH} + \text{H}_2\text{O} + \text{NH}_2^\bullet$
③: $\text{NH}_3 + \text{CH}_2\text{COOH} + \text{H}_2\text{O} + \text{NH}_2^\bullet$
④: $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}(\text{Gly}) + \text{NH}_3 + \text{H}_2\text{O}$

考察

- ・全反応エネルギーは-99.7kcal/molであった。
- ・ $\text{NH}_2\cdot$ と $\cdot\text{CH}_2\text{COOH}$ から Glycine が生成される反応が最も起こりやすい反応過程(-87.2kcal/mol)になっている。

考察

- ・すべての反応が発熱反応で進む

 反応が進むほど安定となるため、Garrodのモデルでの $T \sim 55\text{K}$ での反応は起こりうる

- ・今後の課題:

各反応の反応障壁の計算

ほかの考えられる経路についてのエネルギーの計算

まとめ

- Garrodの提示するダスト表面での $T \sim 55\text{K}$ での反応はすべて発熱反応である
- 全反応エネルギーは -99.7kcal/mol

ダストの形成と恒星の成り立ち

