

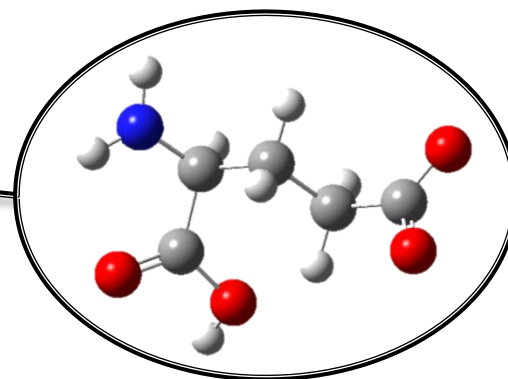
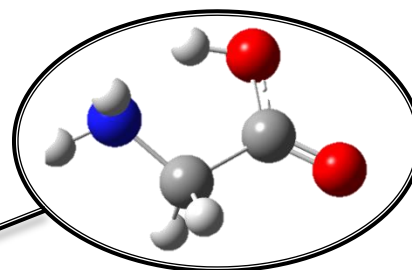
分子雲中でのGlycine形成に ついての理論的検討

$\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CO}\cdot$ 中間体を経由する低温ラジカル反応

筑波大学 物理学類4年 北澤優也

背景

- ▶ 始まりはマーチソン隕石中のアミノ酸



生命の起源は宇宙にある!?

分子雲

観測されている分子の一例

H_2 , CO , NH_3 , CS , H_2O , CH_4

HCN , CH_3CN , HC_5N

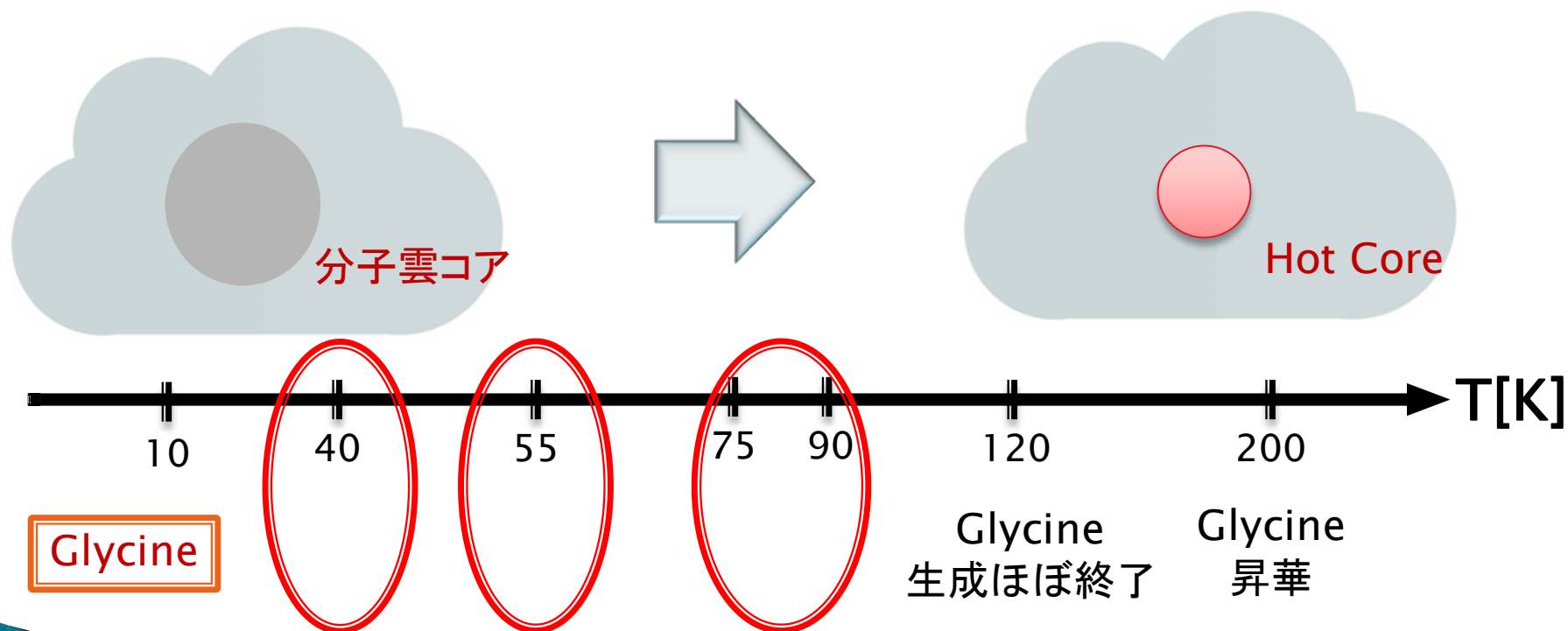
H_2CO , CH_2NH , CH_3OH

$\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CN}$ (アミノアセトリル)



アミノ酸

- Garrod, R.T. (2013) の論文
「A THREE PHASE CHEMICAL MODEL OF HOT CORES : THE
FORMATION OF GLYCINE」
で Glycine 生成機構 ($T \sim 40\text{K}, 55\text{K}, 75-90\text{K}$) が提案された。

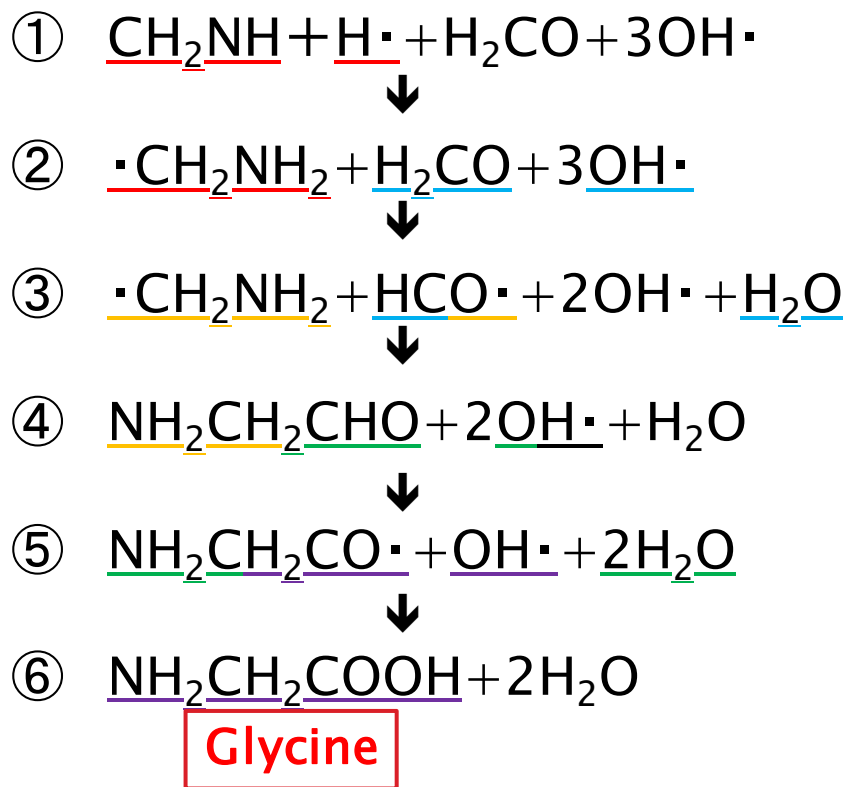


目的

- ▶ 最も単純なアミノ酸であるGlycineの生成過程を調べる。
- ▶ T~40KでのGlycine生成機構を検討する。
 - Garrodによって提案されたGlycine生成経路(T~40K)について、エネルギー状態や最安定構造を求める。

➤ Glycine生成過程 (T~40K)

- ダストを3-phaseモデル(気相+ice表面+bulk ice mantle)で仮定
- ダスト表面でのラジカル反応(気相反応は効かない)



計算手法

- ▶ 分子軌道を第一原理的に求めることで、分子の正確なエネルギーや構造を予測する。

- Software : Gaussian09

- 構造最適化計算 (UB3LYP/6-31G(d))

➤ 密度汎関数理論

- Kohn-Sham equation

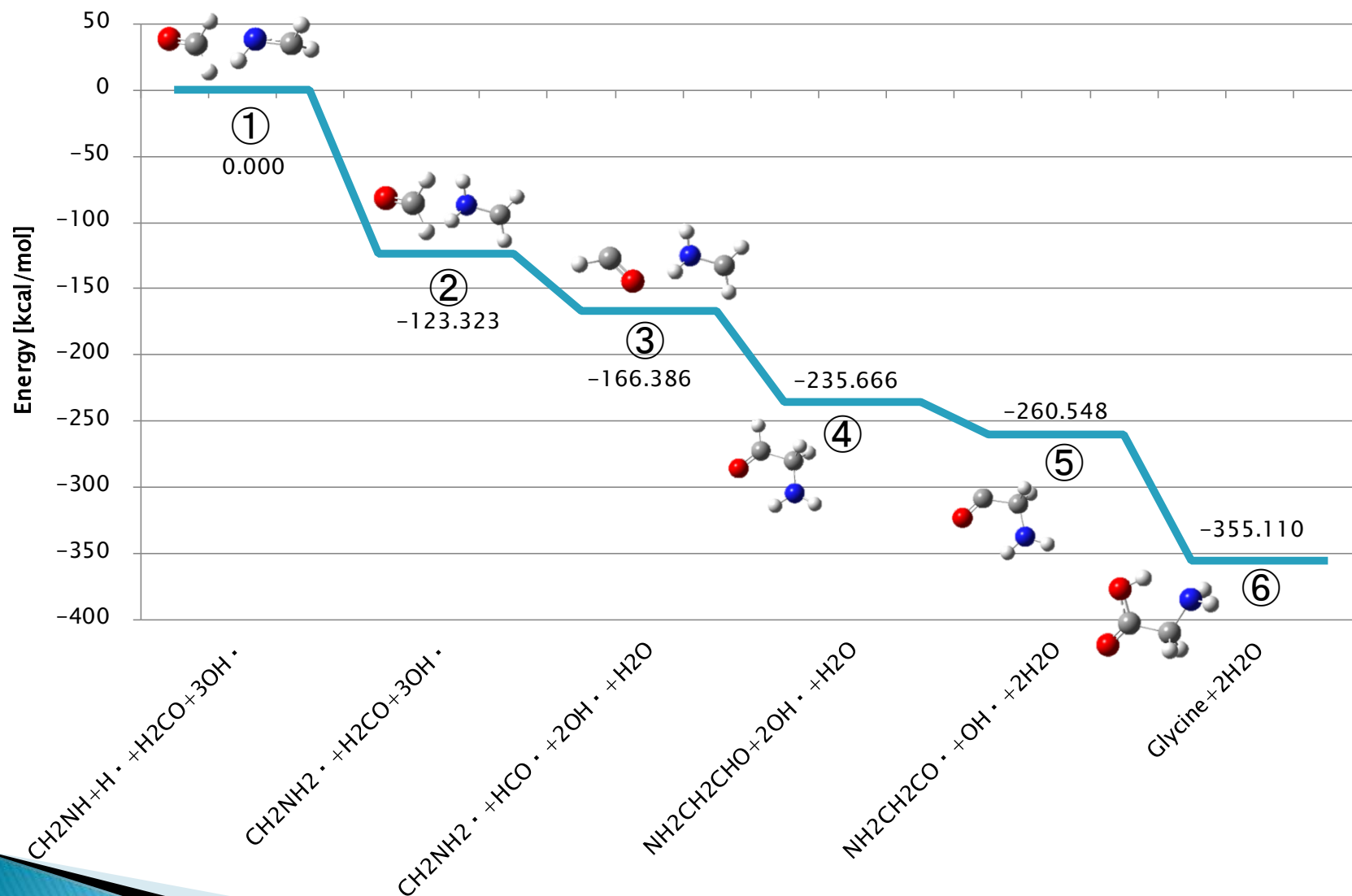
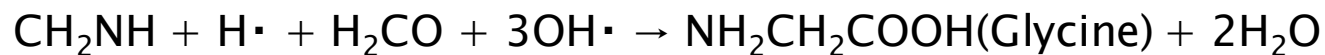
$$\left[-\frac{1}{2}\Delta - \sum_A^{N_{atom}} \frac{Z_A}{|r - R_A|} + \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr' + \mu_{XC} \right] \phi_i(r) = \epsilon_i \phi_i(r)$$

$\rho(r) = \sum_{i=1}^{N_{elec}} |\phi_i(r)|^2$: 電子密度 Z_A, R_A : 原子核Aの電荷、座標

$\phi_i(r)$: 分子軌道 μ_{XC} : 交換相関ポテンシャル

ϵ_i : Kohn-Sham軌道エネルギー

結果



考察1

- ▶ ①→②の反応と⑤→⑥の反応がエネルギー差が大きく、反応が起こりやすい。
 - ①→②: $\text{CH}_2\text{NH} + \text{H}\cdot \rightarrow \cdot\text{CH}_2\text{NH}_2$ (-123.323kcal/mol)
 - ⑤→⑥: $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CO}\cdot + \text{OH}\cdot \rightarrow \text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ (-94.562kcal/mol)
- ▶ 始状態から終状態までのエネルギー差が 355kcal/mol と大きいいため反応障壁が低くなると考えられる。この反応過程を使えば低温でもGlycineが生成できる。

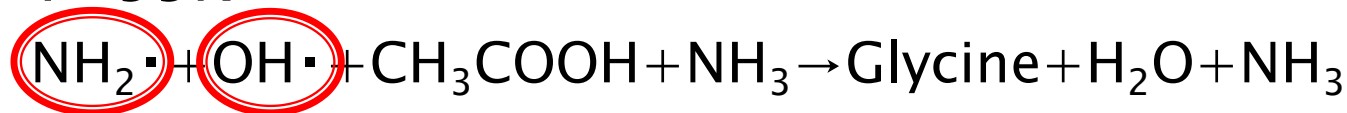
考察2

- ▶ ただし、 $T=55\text{K}$ の場合や $T=75\sim 90\text{K}$ の場合に比べて反応には $\text{H}\cdot$ と多くの $\text{OH}\cdot$ が必要となる。

- $T=40\text{K}$



- $T=55\text{K}$



- $T=75\sim 90\text{K}$



まとめ

- ▶ T~40KでのGlycine生成は355kcal/mol(15.4eV)の発熱反応であることがわかった。
- ▶ すべての過程で反応物より生成物のほうがエネルギーが低くなった。
- ▶ H・と多くのOH・が存在すれば、この反応経路によってGlycineは生成できると考えられる。
- ▶ 今後は遷移状態の計算をし、T~40KでのGlycine生成機構を明らかにしたい。