

# 星間分子雲中での酸化エチレンの 生成反応の検証

筑波大学理工学群物理学類 4年  
中村帆南

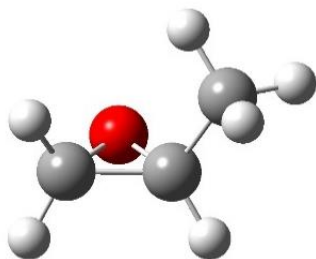
# 星間分子

- 星間分子雲
  - 星形成の場
  - 星間分子雲中には星間ガスや星間ダストが存在し、それらが集まって星が形成される
- 星間分子
  - 現在、約190種類の星間分子が見つまっている
  - アミノ酸は未検出

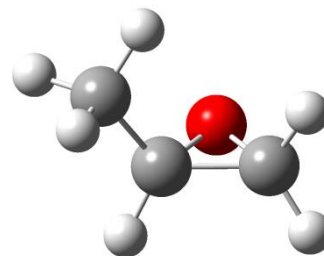
# キラル分子の発見 —Brett A. McGire (2016)

「Discovery of the interstellar chiral molecule  
propylene oxide( $\text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{O}$ )」

- 星間空間で初めてのキラル分子：酸化プロピレン( $\text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{O}$ )が、いて座B2分子雲で発見された。



S-propylene oxide



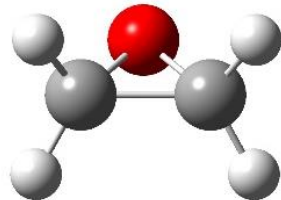
R-propylene oxide

➤地球生命のホモキラリティ起源の解明につながる？

# 酸化エチレン(c-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O)

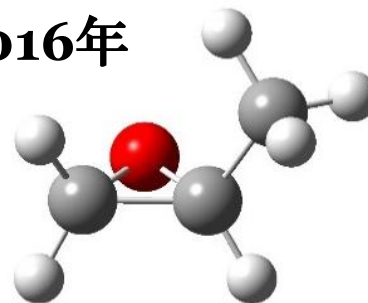
- 酸化プロピレンと似た構造で、既に星間空間で観測されているため、いくつか反応経路が提案されている

1997年



ethylene oxide

2016年



propylene oxide

# 目的

酸化エチレンの  
生成反応の検証  
…卒業研究

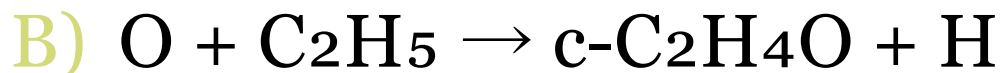
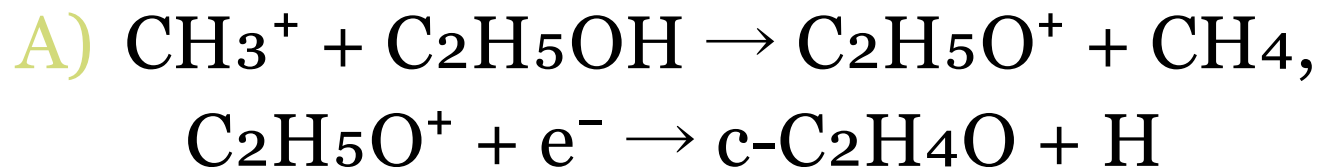
酸化プロピレン  
生成過程の解明

生体分子のホモ  
キラリティ起源  
について

# Dickens(1997)

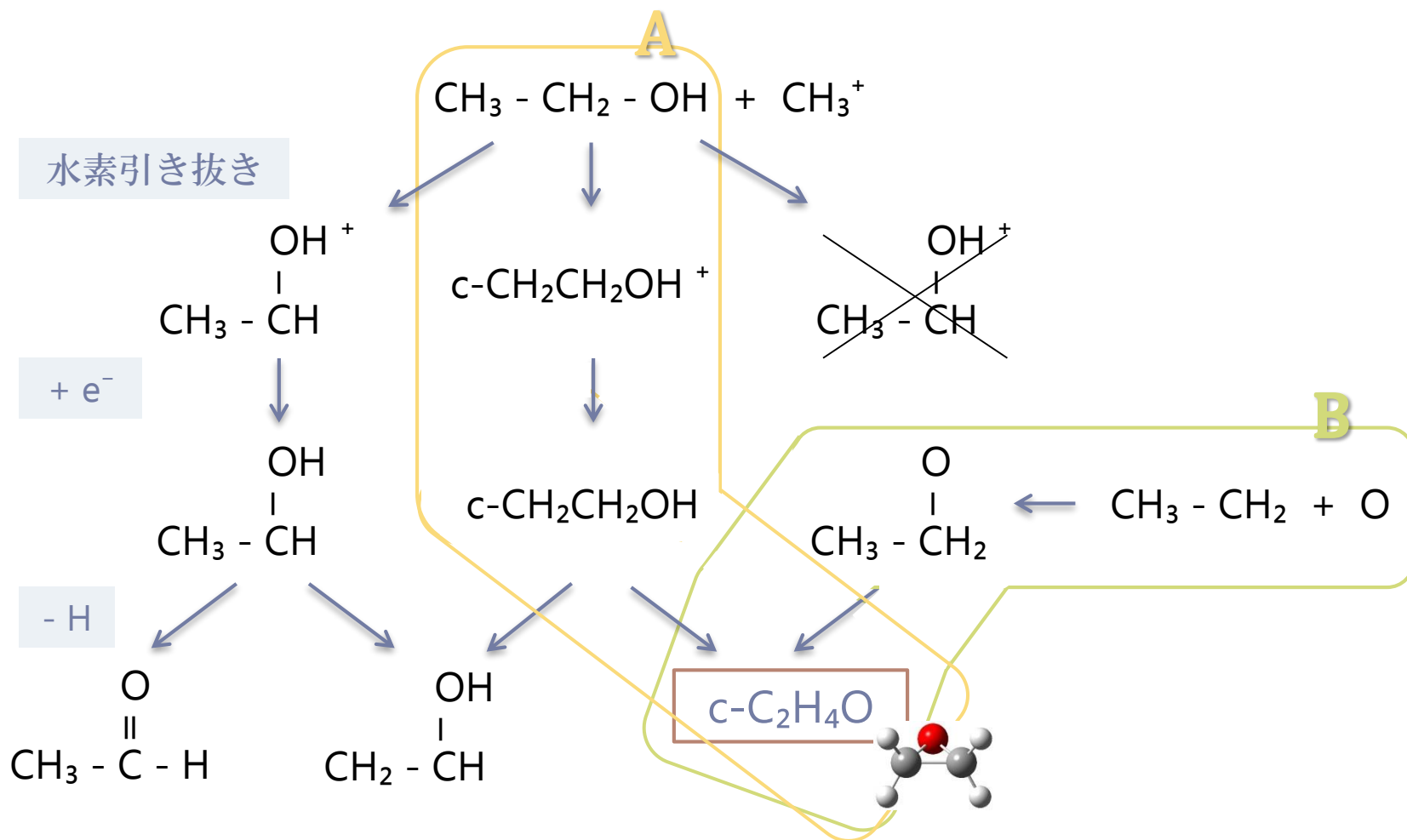
「DETECTION OF INTERSTELLAR ETHYLENE OXIDE(c-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O)」

- 星間空間であることを考慮した酸化エチレンの反応経路が提案されている。



➤ 中間体C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>Oができる場合について計算

# 反応経路



# 計算手法

- 密度汎関数理論(Density Functional Theory, DFT)

- Kohn-Sham 方程式

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

$Z_A$  : 原子番号

$\mu_{xc}$  : 交換相関ポテンシャル

$R_A$  : 原子核半径

- 基底関数 : B3LYP/6-31G\*

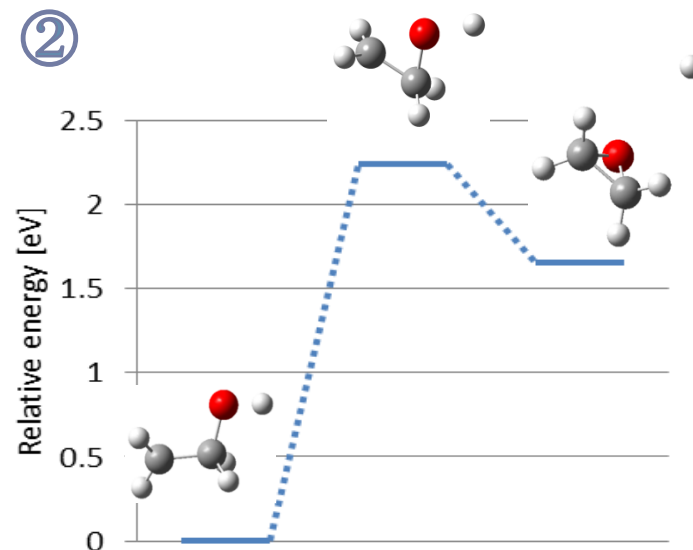
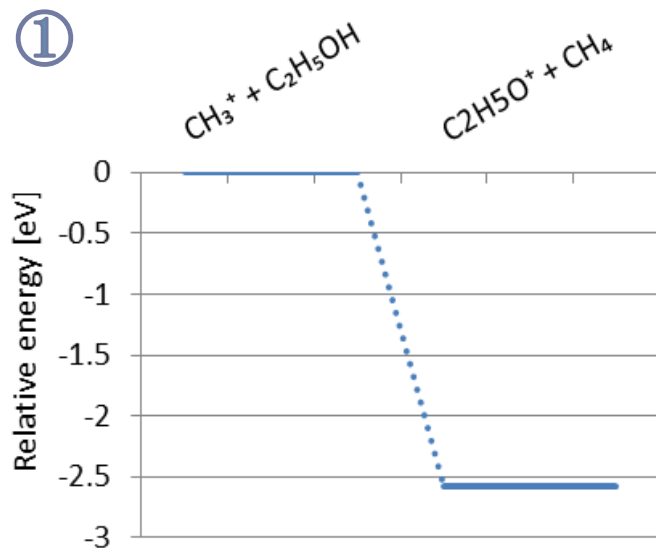
- Gaussian 09

- 量子力学計算の標準的なソフトウェア

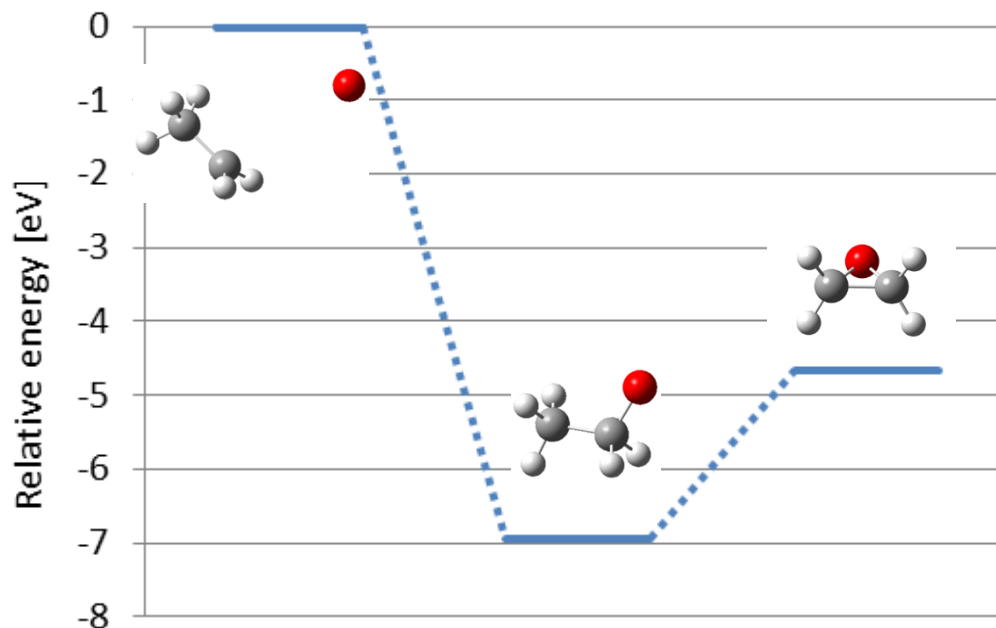
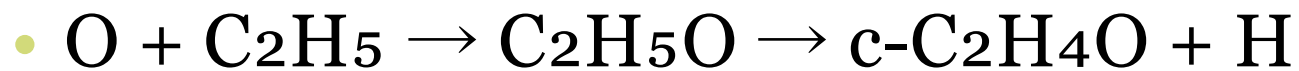


# A) 結果

- $\text{CH}_3^+ + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{O}^+ + \text{CH}_4, \quad \dots \textcircled{1}$   
 $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{c-C}_2\text{H}_4\text{O} + \text{H} \quad \dots \textcircled{2}$



## B) 結果



# 考察

- A) ①反応障壁がないので、容易に起こる。
- ② $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$ から酸化エチレンが生成する経路は $2.24[\text{eV}]$ 程度の反応障壁があるが、 $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}^+$ と $\text{e}^-$ が反応する際のエネルギーを考慮すると、反応障壁を超えることができると考えられる。
- B) 中間体の方が安定。直接酸化エチレンができる経路は今後検証する。

## まとめ

- 提案されている2つの反応経路について、中間体の安定性と反応障壁の高さを検証した
- 今後の課題
  - 他の生成物が生成する経路との比較
  - 他の考えられる反応経路についても計算