

# 宇宙ダスト上におけるアミノ酸生成の理論的研究

木立 佳里 (筑波大学大学院 数理物質科学研究科)

## Abstract

分子雲や隕石からはすでに複雑な有機物やアミノ酸が見つまっているため、アミノ酸は宇宙空間で形成されていると考えられている。本研究では、様々なアミノ酸生成過程の中でも一般的な過程について、中間体の生成経路での安定性を基底状態エネルギーから評価することで、宇宙でのアミノ酸生成過程を解明することを試みた。グリシン及びアラニンの生成経路について高精度な第一原理計算により調べた。グリシン、アラニンともに経路中で最も安定であり、過剰に安定した中間体もなかった。そのため、ホルムアルデヒドなどの構成分子があればアミノ酸形成は起こりうるということがわかった。

## 1 Introduction

宇宙での有機物生成、さらに高分子有機物への成長過程は、未だ不明な点が多いものの、宇宙ダストが化学進化において重要な役割を担っていると考えられている。星間分子雲の気相成分である H、C、N、O のような比較的軽い元素がダスト表面に凍りつき、 $\text{H}_2\text{O}$  だけではなく  $\text{CO}$  や  $\text{CO}_2$  なども含んだ氷を形成し、H の付加反応などにより単純な有機物が生成される。さらに、その氷へ紫外線や宇宙線が照射されると光化学反応によって高分子有機物が生成される。ダスト上で生成された有機物は隕石や彗星に保存され、原始地球に運ばれてきたと考えられている。

現在、星間空間でのアミノ酸前駆体としていくつかの有機物が候補に挙げられている。例えば、巨大分子雲から見つまっているアミノアセトニトリル [1] や隕石中から検出されているヒダントインなどがある [2]。この 2 つの有機物は加水分解によってアミノ酸を形成する。

ダスト表面でのアミノ酸生成は様々な反応経路が考えられるが、本研究では、星間分子として見つかった単純な分子から、アミノニトリル及びヒダントインを経由する、一般的な生成過程について解析を行った (図 1)。反応経路中のヒダントインなどの中間体の基底状態エネルギーから安定性を評価することで、宇宙におけるアミノ酸生成の仕組みの解明を試みた。

## 2 Methods

### 2.1 密度汎関数理論

反応経路の中間体の基底状態のエネルギーを求めするために、密度汎関数理論を用いた。密度汎関数理論は電子密度  $n(\mathbf{r})$  より  $N$  電子系のエネルギーを計算する理論である [3][4]。この理論に基づく計算手法で用いるのが以下の Kohn-Sham 方程式である。

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{\text{eff}}(\mathbf{r})\right]\phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\phi_i(\mathbf{r}) \quad (1)$$

$$v_{\text{eff}} = v(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \mu_{xc} \quad (2)$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (3)$$

式 (2) の  $v_{\text{eff}}(\mathbf{r})$  は有効ポテンシャルである。 $\mu_{xc}$  は交換相関ポテンシャルと呼ばれ、電子の運動エネルギー、クーロン相互作用に含まれていない全ての多体効果を含む。 $n(\mathbf{r})$  は電子密度、 $\phi_i(\mathbf{r})$  は Kohn-Sham 軌道と呼ばれ、波動関数を再現している。

### 2.2 反応経路

今回、単純なアミノ酸であるグリシンとアラニンの生成経路として、図 1 のような経路に対して解析を行った。この反応の反応物であるアルデヒド、 $\text{HCN}$ 、 $\text{NH}_3$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}$  は星間分子としても見つまっている。アミノニトリルの生成・加水分解は Strecker 反応、

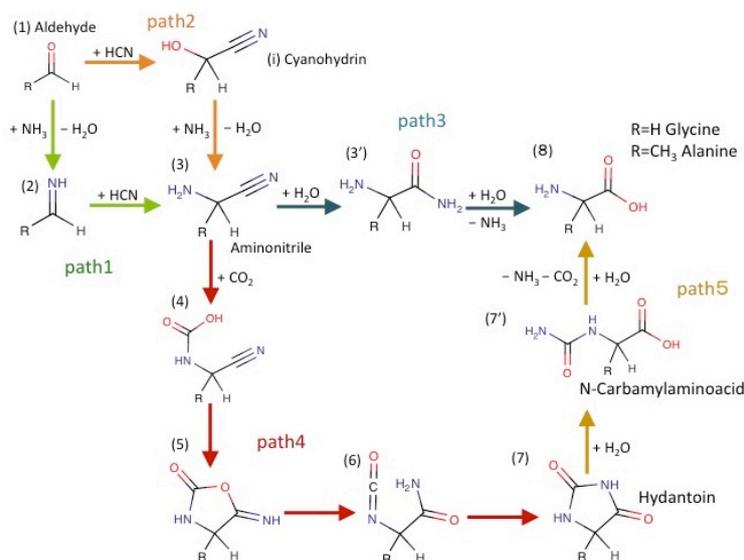


図 1: アミノ酸生成経路

ヒダントインの形成は Bucherer-Bergs 反応と呼ばれる、実験からすでに知られている化学反応である。

## 2.3 計算プログラム

本研究では、計算プログラム Gaussian09 を用い、密度汎関数法による B3LYP 交換相関汎関数 [5]、基底関数 6-31G\* での基底状態の構造最適化計算を行った。また、水溶液中での反応経路を解析するために Polarizable Continuum Mode (PCM) により溶媒の誘電率を考慮した計算も行った。

## 3 Results

図 1 で示した生成経路に対して、真空中及び水溶液中でのエネルギーを計算した。最終的な生成物であるアミノ酸を基準にした時の中間体の相対エネルギーを図 2、図 3 に示した。

真空中ではアミノ酸が最も安定であり、過剰に安定な中間体もなかった。また、中間体 (2) はエネルギーが高いが、中間体 (i) はアルデヒド (1) よりも安定しているため、path1 ではなく path2 を経路すれ

ば、グリシン及びアラニンが生成され得ると考えられる。

水溶液中では、中間体 (2) だけではなく、中間体 (4) も生成エネルギーが高い結果になった。そのため、ヒダントインを経由する反応が起こりにくい可能性があることがわかった。

## 4 Conclusion

単純なアミノ酸であるグリシン及びアラニンの生成過程について量子化学計算により解析した。結果はグリシン、アラニンともに、今回調べた経路内では最も安定であり、過剰に安定な中間体も存在しなかった。よって、反応物であるアルデヒド、HCN、 $\text{NH}_3$ 、 $\text{H}_2\text{O}$  があれば、真空中でグリシン及びアラニンは形成され得ることがわかった。また、水溶液中でもアミノ酸は生成されるがヒダントインが形成されない可能性が考えられる。しかし、本研究では溶媒の誘電率のみを考慮しているため、水分子との相互作用を計算する必要がある。また、今回解析した反応経路の遷移状態を求めることで、どのような環境が必要であるか明らかにする必要がある。

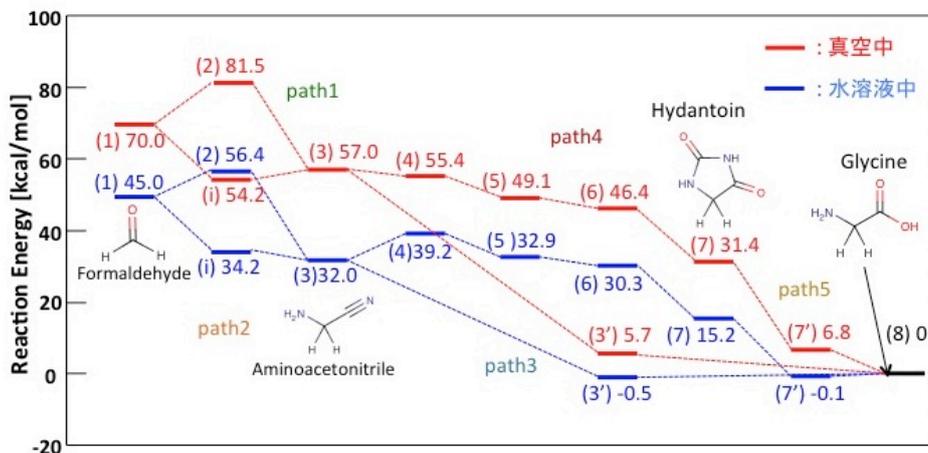


図 2: グリシン生成過程のエネルギープロファイル

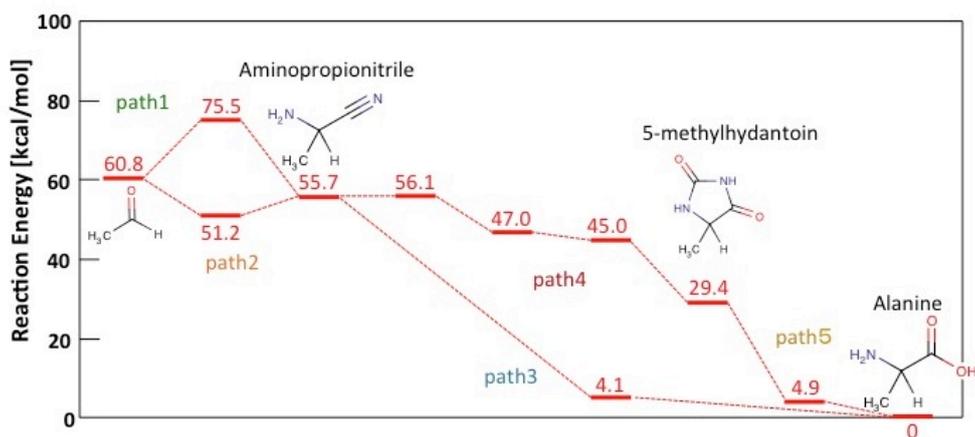


図 3: アラニン生成過程のエネルギープロファイル

## Reference

- [1] A. Belloche et al. (2008) *A&A*, 482, 179
- [2] G. W. Cooper, and Cronin. (1995) *Geochim. Cosmochim. Acta.* 59, 11003
- [3] P. Hohenberg, and W. Khon, (1964) *Phys. Rev.* 136, 864
- [4] W. Kohn, and L. J. Sham, (1965) *Phys. Rev.* 140, A113
- [5] D. A. Becke, (1988) *Phys. Rev. A* 38, 3098
- [6] Gaussian 09, Revision B.01, M. J. Frisch, et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.