

Z321a 宇宙空間でのアミノ酸生成反応機構についての理論的研究

庄司光男、木立佳里、佐藤皓允、小松勇、相川祐理、重田育照、梅村雅之（筑波大）

星間雲中における分子の化学進化は未だ不明な点が多いため、宇宙観測や地上実験により分子形成を検討する研究が近年盛んに行われている。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（G. W. Cooper et al. 1995）。また、観測ではニトリル等のアミノ酸前駆体も見つかっていることから、星間雲中において生体を構成する有機分子（アミノ酸）や高分子が生成されていると予想されている。ALMAでもアミノ酸の直接検出が期待されている。

しかしながら、アミノ酸生成は最も単純なグリシンであっても膨大な反応経路が考えられるため、全貌を解明することは容易ではない。本研究では、グリシンの生成機構について（1）一般的化学合成反応経路と（2）ラジカル反応の2つの機構に絞り、高精度第一原理計算（密度汎関数法）により反応機構を検討した。前者については反応物に水1分子を加えることで氷ダスト上を仮定したモデルで反応機構を検討した。

その結果、化学合成経路では水分子により大きく反応障壁が減少するものの、星間雲での温度に対し、反応障壁が高すぎるということが明らかになった。一方でラジカル反応機構は反応障壁がほとんどない事が明らかになった。そのため、星間中ではラジカル反応過程が好ましいことを支持する結果となった。

京とポスト京を用いる事でリアリストックシミュレーションが可能となる。スパコンの計算能力を活かした研究の発展と関連する重要な未解決問題についても考察する。