

## Q50c 生体関連分子の abiotic な生成過程の理論的説明

小松勇（アストロバイオロジーセンター, 国立天文台）, 鈴木大輝（アストロバイオロジーセンター, 国立天文台）

最も単純なアミノ酸であるグリシンが彗星のその場観測で検出されており、このような生体関連の有機分子が形成される過程について、その生成現場の環境とあわせて議論できるようになっている。我々人類に至る、宇宙における化学進化を理解する上で、このような有機分子の反応機構を解明することは極めて重要である。

星間分子の化学反応経路の推定は分子の電子構造を頭に掲げ、量子化学の遷移状態計算によってもなされている。しかし、特に複雑有機分子に関してはデータベースが不十分であり、室内実験などを元に起こり得る反応経路を予め決定しておいてから反応障壁を推定することになり、複雑な反応の一部の評価に留まらざるを得ない。

本研究では着目している有機分子に至る化学反応のネットワークを自動探索によって推定し、各々の反応障壁を見積もった。今回メインで発表する、DNA、RNA の遺伝暗号の元になっている核酸塩基以外にも、多環芳香族炭化水素（PAH）やアミノ酸などをターゲットとしており、その生成経路を定量的に評価することで物理化学的な観点から今後の観測の礎を築くことを目指している。まずは気相中での反応を広く押さえてから詳細な評価をする。本講演では上記の分子について推定された反応ネットワークについて発表する。

核酸塩基と、その骨格構造であるピリミジン、プリン生成経路を評価した。例えば、RNA の遺伝暗号であるウラシルの経路については、3-4 分子程の単純な分子から出発して、再現実験でも検出されているイソシアン酸を経由する反応が幾つか発見された。現在分子雲の化学進化モデルとの接続を試みているが、初期地球における分子生成の解明にも役立つ。今後は惑星大気、原始惑星系円盤などのモデルへの応用を検討している。