

Q23a 量子化学計算による  $C_2H_2N_2$  の形成プロセスの探索

米津鉄平, 前澤裕之 (大阪府立大学)

地球の生命の設計図である DNA や RNA の構成要素、核酸塩基の初期の起源は未解明となっている。アミノ酸では、生物のタンパク質を造るアミノ酸と同様の左型の鏡像異性体 (ホモキラリティー) が隕石からも検出されていることから、生命と宇宙起源のアミノ酸の関わりも議論されている。核酸塩基は、生物において新生経路によって自身でも造ることが出来るが、隕石からも検出されているため、宇宙起源の核酸塩基が生命に利用された可能性は十分に考えられる。核酸塩基は、星間物質を模した実験室の氷ダストの表面やプラズマの放電などでも造ることが出来るが、その形成過程はまだ良く分かっていない。核酸塩基のアデニンについては、 $C_2H_2N_2$  を経由している可能性があり、Sgr B2(N) などの分子雲において E-HNCHCN の観測報告がある。ただし、HCN の重合により HNCHCN を経由してアデニンを形成するには、活性化エネルギーが高いため少なくとも気相において星形成の時間スケールでは進行が難しいとの指摘もあり、HNCHCN の形成過程自体も良く分かっていない。我々の実験室では、分子雲などの組成環境を模した環境でプラズマ放電によるアデニンの形成が可能である。その反応過程の気相からは、質量分析により、HNCHCN と同じ 54 の質量数を持つ分子、 $NH_2CH_2CN$  と同じ 56 の質量数を持つ分子が検出されている。そこで、E/Z-HNCHCN が HCN の重合反応以外の反応で形成される可能性について、密度汎関数法による量子化学計算により反応経路の探索を行った。計算方法、基底関数には、B3LYP/6-31G(d,p) を用いた。その結果、 $NH_2CH_2CN$  から E/Z-HNCHCN を形成するルート (Zaleski et al. 2013) の他に、 $NH_2CH_2CN$  の後に  $NH_3CHCN$  などを経由することで、途中の遷移状態の活性化エネルギーを抑えて E/Z-HNCHCN に至るルートなどがあることも分かった。本講演では、これら一連の解析結果について報告する。