

## P214b 有機ダストプラズマにおけるダストの成分同定に向けた解析手法の検討

米津 鉄平, 松原 浩, 前澤 裕之 (大阪公立大学)

我々は星間ガスなどを模したプラズマ放電により、有機物からなるアグリゲート状のダストの合成を行い (前澤、米津 23年春季年会)、プラズマの気相分子について超伝導検出素子を用いた mm-THz 波帯ヘテロダイナミック分光診断を推進している (米津、前澤 22年秋季年会)。さらにダスト内の有機物のサーベイも進めており、星間分子雲や星形成領域におけるアミノ酸や核酸塩基などの複雑な有機分子の形成過程の多様性を探っている。

こうした中で我々が利用している高速液体クロマトグラフィー (HPLC) 解析や液体クロマトグラフィー/質量分析 (LC/MS) において、形成されたダストに含まれる有機化合物を広範かつ高精度に同定するには、一般には保持時間や質量 (/質量) スペクトルをリファレンスとなる標準物質 (標品) と比較する必要がある。しかし、標品となる化合物のデータベースには、構造異性体が大量に登録されており、全てを分析してダストの測定結果と比較することは難しい。そこで、期待される分子とデータベース上の分子の Molecular Fingerprints (RDKit) の類似度と各分子の安定性に着目し、データベースから優先して LC/MS 解析を行いダストの測定結果と比較するための標品の判定手法を開発した。Molecular Fingerprints は分子中に含まれる様々な部分構造の特徴を 0 と 1 のビット配列で表現するもので、これを用いて期待される生体高分子がもつ構造と、データベース上の同組成の分子構造の類似度を判定し、さらにエネルギー計算により安定性の高い分子を抽出することで、LC/MS 解析を優先して行う標品を判定できるようにした。この手法は、原子数が増え複雑な組成になるほど効果的であると期待される。本講演では、これら一連の手法と解析結果について詳細を報告する。