

Q20a Global Reaction Route Mappingによる $C_2H_2N_2$ の反応経路網の探索/解析

米津 鉄平, 北村 太一, 山内 良斗, 尾田 拓人, 松本 侑大, 前澤 裕之 (大阪公立大学)

近年、隕石やサンプルリターンミッションにおける試料からアミノ酸や核酸塩基などの生体関連分子を探る研究が急速に進み、大質量星形成領域などではこれらの前駆体分子のスペクトル線の検出も報告されている (Nakamura et al. 2022、他)。また、星間空間における有機分子の形成過程の検証が量子化学計算や表面/気相反応を取り入れたモデル計算 (Zhang et al. 2020、他) などにより進められている。ただ、これらの複雑な有機分子の構造や反応経路は、原子数が多くなるにつれて多岐に渡るため、その形成過程を網羅的に探ることは難しい。

そこで、本研究では核酸塩基アデニンの前駆体の1つとも考えられているHCNの2量体 $C_2H_2N_2$ に着目し、Global Reaction Route Mapping(GRRM)プログラム (Ohno et al. 2004、他) を用いて、 $C_2H_2N_2$ の反応経路ネットワークの全面探索を行った。その結果、計68種の構造異性体が見つかり、炭素Cと窒素Nからなる基本骨格に着目したところ、線形分子や環状分子などの構造に分類できることが分かった。さらに、独自のツールにより、 $C_2H_2N_2$ が形成される反応経路を遷移状態のエネルギー障壁 ΔE の上限ごとに抽出した。抽出した反応経路の全体数に対する、各 $C_2H_2N_2$ の構造異性体への反応経路数の割合を求めた結果、エネルギー障壁 ΔE の上限の違いによって、支配的となる基本骨格が異なり、また、その基本骨格を持つ分子の中でも有意に割合の高い分子種を分別することができた。これまでに、星間空間における観測例もある $C_2H_2N_2$ のZ-(E)-HNCHCNに加え、HNNCCHといった分子も形成されやすい可能性があることも示唆された。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。