

P123b 星間空間におけるカルバミン酸およびその関連分子の  
表面反応に関する量子化学的研究

川口守李, 小松勇 (茨城大学)

我々を構成しているアミノ酸のうち最も単純な分子であるグリシンは小惑星などで観測されているものの、分子雲からは観測されておらず、星間空間における合成過程の解明が期待される。尿素やイソシアン酸などのグリシンの中間体となる物質はすでに観測されており (Remijan et al.(2014), Furre et al.(2016), Snyder & Buhl(1972))、さらにこれらの中間体の前駆体としてカルバミン酸が位置付けられる (Tsipis et al.(2005), Marks et al.(2023))。本研究では、星間ダストにおける水分子との表面反応に着目し、グリシンの類似分子のカルバミン酸とその二量体、アンモニウム塩の生成過程の遷移状態を量子化学計算を用いて推定し、星間空間中におけるカルバミン酸の合成過程を評価した。

量子化学計算の結果、二酸化炭素とアンモニアからカルバミン酸単量体を合成するには 44.9kcal/mol が必要であることがわかった。これは先行研究の計算結果 (Tsipis et al.(2005)) と一致する。また、水を含む系における振動モードを推定し、模擬実験において今後の天文観測に有力とされたピーク (Rodriguez et al.(2013)) と概ね一致していた。興味深いことに、カルバミン酸に水 1-2 分子を付加した系と比較して、20 分子の水クラスター上にカルバミン酸を吸着させた系では、C-N Stretching のピークが急激に大きくなっていた。それらの原因について、水の数と配向による依存性を詳細に調べる。