

アミノアセトニトリル関連分子の合成経路の探索

(埼玉大理) ○本田知大, 千葉幸枝, 佐藤和宇真, 高柳敏幸

星間分子の中から生体関連分子を見出すことは、地球上の生命の起源を理解する上で重要な問題である。星間分子は現在までに150種類以上が発見されているが、アミノ酸はまだ見つかっていない。しかし、最も簡単なアミノ酸であるグリシン $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ の前駆体となり得るアミノアセトニトリル $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{N}$ はすでに星形成領域 SgrB2(N) で検出されている^[1]。

我々は、アミノアセトニトリルを与える分子としてシアノメタンイミン $\text{NH}=\text{CH}-\text{C}\equiv\text{N}$ に着目した。この分子は星間空間ではまだ発見されていないが、アミノアセトニトリルと共通した $\text{N}-\text{C}-\text{C}-\text{N}$ 骨格をもっており、アミノアセトニトリルよりも水素原子の少ない不飽和な分子である。そのためシアノメタンイミンは、宇宙塵上での水素付加によりアミノアセトニトリルを与えられと考えられる。したがって、我々はシアノメタンイミンの形成を理解することが重要であると考えている。

今回我々は、気相中でシアノメタンイミンが生成する次の反応について研究を行った。



この反応の一部はすでにBasiukによって研究されている^[2] が、この反応の全ポテンシャルエネルギー曲面の探索はまだ行われていない。そこで我々はGRRM(Global Reaction Route Mapping)法^[3]を用いてB3LYPで全反応経路の探索を行った。さらに、得られた経路のうちシアノメタンイミンを与える経路については、より精度の高いCCSD(T)にて計算を行った。また、付加および脱離の詳細なポテンシャルエネルギーカーブについては、Molproを用いて分子の対称性を考慮した計算を行った。

さらにシアノメタンイミン $\text{NH}=\text{CH}-\text{C}\equiv\text{N}$ の形成と類似の反応として、シアノホルムアルデヒド $\text{O}=\text{CH}-\text{C}\equiv\text{N}$ が生成する反応も扱った。



この反応の反応物、生成物はいずれも星間空間で発見されているものである。シアノホルムアルデヒドは、アンモニアと反応することでシアノメタンイミンへと変換され得る分子である。また、シアノホルムアルデヒドとシアノメタンイミンは互いに等電子的な関係にあり、これらの反応経路は似ていると予想される。

上記の二つの反応の反応経路探索についての計算結果を当日報告する。

[1] Belloche A., Menten K. M., Comito C., et al. *A&A* **482**, 179-196 (2008).

[2] Basiuk. V. A., *J. Phys. Chem. A*. **105**, 4252-4258 (2001).

[3] Ohno K, Maeda S, *Chem. Phys. Lett.* **384**, 277-282 (2004).