

モンテカルロシミュレーションによる星間複雑有機物合成の反応経路探索

○落合葉子¹, 井田茂¹, 庄司大悟²

¹東京工業大学 地球生命研究所, ²JAXA/ISAS

これまで、多数の隕石試料や小惑星リュウグウのサンプルから豊富な有機物が発見されている。また、ALMAをはじめとする高性能望遠鏡によって、星間空間に存在する有機分子も観測されている。それらの中には、多くの複雑有機分子さえも含まれており、我々の想像を遥かに超える多様な化学過程が宇宙で起きていることを示唆している。それゆえ、これらの有機物の形成過程を解明することは、宇宙における化学進化や地球外生命の可能性を理解するための重要な鍵となる。

星間空間の複雑有機分子が合成される場所の一つは、宇宙を浮遊する氷の塵の表面である。塵に紫外線や宇宙線が照射すると、表面に凍っていた炭素や酸素を含む分子の結合が切れて活性化され、化学反応が駆動される。このような状況を模擬した実験や量子化学計算はこれまでに多く行われており、様々な種類の有機物の生成が確認されている。一方で、これら従来のアプローチでは、反応に関わる分子の数の多さや反応過程の複雑さゆえに、反応ネットワークの全容を明らかにすることは難しい。本研究の目的は、そのような複雑な化学反応経路を探索し、宇宙塵の表面で合成される複雑有機物の種類及びそれらの合成過程を明らかにすることである。本研究では、Takehara et al. (2022)で提案された化学反応シミュレーションの計算モデルをプロトタイプとして用いる。彼らのモデルではモンテカルロ法を用い、考えられる反応経路の候補の中から確率的な経路選択を繰り返すことで反応を進行させる。各反応が選ばれる確率は、近似的に計算された活性化エネルギーを用いて重み付けされる。したがって、本手法は量子計算による高い精度を大胆に切り捨てることで計算コストを軽減し、これまで扱えなかった複雑な有機分子へつながる反応ネットワークを探索することを目指す。また、本研究では先行研究で提案された計算モデルに、新たに紫外線照射によるラジカル反応や、反応のタイムスケールを取り入れたことでモデルの改良を行なった。

本発表では、原始惑星系円盤内の氷塵表面で起きる化学反応のシミュレーション結果を示す。初めに、メタノールや水、アンモニアなどの単純な分子からなる初期物質がUV照射によって複雑な有機分子へと進化する過程を示す。これらの合成メカニズムとして、初期物質の継続的なラジカル化、そして生成されたラジカル同士によるランダムな再結合によって、分子種の多様性が生じることが明らかとなった。また、このような反応によってアミノ酸や糖などの生体分子も同時に合成されることがわかった。最後に、実験結果との比較を行い、本計算結果の整合性及び課題について議論する。