

## 初期太陽系形成過程におけるL型アミノ酸過剰生成機構の理論的研究 Theoretical Investigation of a Mechanism of Chirality Induction for Amino Acids in the Early Solar System

佐藤 皓允<sup>1\*</sup>, 庄司 光男<sup>1</sup>, 神谷 克政<sup>1</sup>, 梅村 雅之<sup>1</sup>, 矢花 一浩<sup>1</sup>, 白石 賢二<sup>1</sup>

SATO, Akimasa<sup>1\*</sup>, Mitsuo Shoji<sup>1</sup>, Katsumasa Kamiya<sup>1</sup>, Masayuki Umemura<sup>1</sup>, Kazuhiro Yabana<sup>1</sup>, Kenji Shiraiishi<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 筑波大学

<sup>1</sup> University of Tsukuba

現在の地球上の生命は、生体高分子であるアミノ酸で形成されている。アミノ酸は鏡像異性体であり、L型とD型が存在する。化学合成ではL型とD型は等量生成されるが、生命のタンパク質合成ではL型アミノ酸のみが生成される。この不斉アミノ酸生成の原因は、未だ解明されておらず、分子進化や生命の起源に関わる謎の一つである。この原因を説明するシナリオとして、初期太陽系形成時、円偏光照射により宇宙空間中のラセミ化アミノ酸が特異的に破壊されることでL型アミノ酸過剰が引き起こされて、現在のL型世界を形成したとする説がある。

近年、上記のシナリオを裏付ける実験結果や観測事実が報告されている。基本的なアミノ酸であるアラニン、バリン、イソバリンやその他のアミノ酸前駆体が隕石中に発見され、それら高分子の存在比も同様にL型に偏っていることが判明した。また一方で、円偏光が広範囲に分布している領域がオリオン座の大質量星形成領域(OMC-1)で観測された。さらに実験室中で、アミノ酸に円偏光を照射することで一方のアミノ酸鏡像異性体により特異的に破壊されることも報告されている。加えて実験で、少量の鏡像異性体過剰が増大し、最終的に支配的になることも分かっている。これらの発見は、生命の起源が地球外由来であること、生命におけるこの偏りと、隕石中で観測された偏りの原因が同じであることを示唆している。この異性体過剰の起源を解明することは、初期太陽系形成時の様子と生命の起源を理解する上で必要不可欠である。しかしながらまた、解明されていない課題も多く残されている。星間空間におけるアミノ酸の化学合成機構や、円偏光照射によるL型アミノ酸過剰の生成機構などは未だ分かっていない。

これらの解明には、アミノ酸の光吸収性と光励起による崩壊・改変反応の過程を解析することが重要である。異性体の偏りは、鏡像異性体に対する特異的な光分解、すなわちラセミ化アミノ酸への円偏光照射による異性化反応が原因であると考えられる。このようなアミノ酸の崩壊過程や構造変化の機構を知るためには、励起状態と励起による解離反応過程を追跡することが必須である。特に異性化反応においては、反応に関わる原子である不斉炭素と主鎖-側鎖をつなげる炭素との結合解離反応について検討する事が最も重要であると考えられる。

本研究では特に、L型アミノ酸の光吸収性とその励起状態を解析した。「円偏光のアミノ酸への照射 電子励起 構造変化」の一連の過程を電子レベルで解明し、円偏光によるアミノ酸過剰の発生を理論的に解明する。そのため、アミノ酸鏡像異性体の円偏光照射下における光物性を、量子論に基づく第一原理計算法(密度汎関数法: DFT)により解析する。アミノ酸の基底状態と円偏光光励起によって生じる励起状態のポテンシャルエネルギー曲線を詳細に明らかにし、断熱過程及び非断熱過程におけるアミノ酸の光構造物性を解明する。得られるポテンシャルエネルギー曲線から、アミノ酸構造破壊につながるエネルギー励起とその円偏光依存性を明らかにする。特に、鏡像異性体を持っている最も基本的なアミノ酸であるアラニンやバリン、イソバリンは他のアミノ酸の異性化に対してもカギとなると考えられるため、これら3つのアミノ酸について解析を行う。

アミノ酸の光物性を調べるため、まず星間空間におけるアミノ酸の安定構造を決定した。さらにその構造における光吸収強度と円偏光二色性を計算し、星間空間においてアミノ酸がどのような光により励起されやすいかを検証した。その後、上述のアミノ酸におけるC-C結合の解離反応を仮定し、反応過程でのポテンシャルエネルギー曲面を計算した。得られたポテンシャルエネルギーから、アミノ酸の構造崩壊・改変を引き起こす様な反応経路を定性的に推定した。

計算の結果、これらのアミノ酸では、励起エネルギーが8-12 eV(励起波長100-150nm)の領域に円偏光二色性のピークがあることが分かった。特に我々は、この領域内から計4本の結合解離反応経路を推定した。アラニンではエネルギー9.81 eVの励起が結合解離を引き起こしやすく、かつ光吸収強度・円偏光二色性共にピークを持つ。バリンでは10.00 eV, 10.91 eVの励起状態が同様の条件を持つ。またイソバリンでは9.32 eVの励起が結合解離反応を誘発している。これら4本の非断熱ポテンシャルカーブは、基底構造において光吸収強度・円偏光二色性共に高い値を持ち、エネルギー的に結合解離を引き起こしやすい。従って、このような反応経路に対する励起がアミノ酸異性体過剰を引き起こす原因となると考えられる。

これらの解析結果は、励起波長110-135nmの領域、従って真空紫外線波長領域の円偏光照射がアミノ酸の異性体過剰を誘発する事を示唆している。

キーワード: 鏡像異性体, アミノ酸, 偏光, 原始太陽系星雲

Keywords: enantiomer, amino acid, polarized light, proto-solar nebula