

衝突蒸気雲内の化学反応シミュレーションとアミノ酸合成への示唆

○落合葉子¹, 井田茂¹, 庄司大悟²

1 東京科学大学 地球生命研究所, 2 ISAS/JAXA

1. 研究背景

天体の高速衝突が起きると、衝突体および標的体の物質が脱ガスすることで衝突蒸気雲が生成される。衝突蒸気雲は、衝突直後の高温高压状態(~数千 K, ~数百 GPa)から、断熱膨張によって急速に冷却が進む。初期の高温段階では、蒸気雲内の化学組成は平衡に到達する。一方で、温度の低下に伴い化学変化のタイムスケールが急激に大きくなることで、化学反応が停止し、非平衡組成が生じると考えられる (e.g. Ishimaru et al. 2010)。初期地球への隕石衝突を模擬した室内実験では、そのような衝突蒸気雲内の化学反応によって、生体分子であるアミノ酸や核酸塩基が生成されたことが報告されており (e.g. Furukawa et al. 2015)、天体衝突イベントが前生命化学において重要な役割を果たした可能性を示唆する。しかし、これらの生体分子をはじめとする複雑な有機分子が衝突蒸気雲内において、どのような化学反応過程で生成されるのかは明らかではない。そこで本研究では、実験生成物の一つであるアミノ酸の生成に注目し、衝突蒸気雲内の化学反応のシミュレーションによって、蒸気雲におけるアミノ酸合成過程を明らかにすることを目的とした。

2. 手法

本研究では、Ochiai et al. (2024)で提案された複雑有機分子合成反応のためのモンテカルロシミュレーションを用いる。これまで衝突蒸気雲内の化学反応に関する理論的研究は、主に第一原理計算が用いられてきた (e.g. Goldman et al. 2010)。しかし、第一原理計算はその計算コストの高さから、非常に短いタイムスケール(~数ピコ秒)の化学反応のシミュレーションにしか適用することができない。したがって、衝突後から化学反応のクエンチまでの一連の反応過程を調べることは難しい。本研究で用いるOchiai et al. (2024)の化学反応シミュレーションは、反応速度を近似的に見積もることで計算コストを大幅に抑えた手法である。そのため、蒸気雲における化学反応をクエンチ過程まで包括的に調べることが可能となる。

一方で、Ochiai et al. (2024)は、原始惑星系円盤に

おける氷ダスト表面の化学反応に着目していたため、低温条件に合わせたモデルが提案された。本研究では、高温の衝突蒸気雲に本シミュレーションを適用するために、化学反応のエントロピー変化を新たに考慮するなどのモデル改良を行った。

本研究では衝突条件として、初期地球への直径 1 km、衝突速度 10 km/s の小惑星衝突を仮定した。これらの条件に基づき計算された、初期温度 5000 K、初期圧力 140 GPa から、断熱膨張による温度圧力変化を仮定して化学反応計算を行った。さらに、インパクト物質として3種類のコンドライト物質; LL コンドライト (普通コンドライト)、CI コンドライト (炭素質コンドライト)、EL コンドライト (エンスタタイトコンドライト) を仮定した。Schaefer and Fegley (2010) の化学平衡計算の結果から、これらが生成する蒸気雲の組成の C:N:O:H 比を決定し、化学反応計算の初期組成を設定した。

3. 結果

本研究では、3種類のインパクト物質(LL, CI, EL コンドライト) に対して、衝突蒸気雲内の生成物のモル分率進化が調べられた。結果は、LL コンドライト組成では、 H_2O や CH_4 、CI コンドライト組成では H_2O や CO_2 、EL コンドライト組成では CO_2 や CO が主成分となることを示す。さらに、我々の計算結果は、衝突が起きてから反応がクエンチするまでの過程を通して、アミノ酸の生成率は非常に低く、最終的なクエンチ組成にはアミノ酸は含まれないことを示す。一方で、その他の反応生成物には、アンモニア、アルデヒド、及びイミン化合物が比較的豊富に含まれる。これらの分子は前生物的なアミノ酸の合成機構として提案されている、ストレッカー反応やホルモース型反応の前駆物質である。したがって本研究の結果は、天体衝突によって合成されるアミノ酸は、気相反応ではなく、蒸気雲内で生成されたアミノ酸前駆物質が、冷却に伴って凝縮した水滴中に濃集し、ストレッカー反応やホルモース型反応などを通じて合成されることを示唆する。