

生命の起源におけるアミノ酸の由来と β 崩壊

福地 知則

Fukuchi Tomonori

1. はじめに

地球上の生命は約 38 億年前に誕生したと言われている。生命誕生の際に生体の構成物質であるアミノ酸がどこから来たのか、その起源については謎とされており、いくつかの仮説がある。古くは 1950 年代のユーリーとミラーによる CH_4 や NH_3 等還元的気体中の放電によるアミノ酸生成実験がある¹⁾。近年では、地球惑星科学の進展に伴い原始地球の大気は酸化了的気体 (CO_2 , 窒素酸化物等) であると考えられるようになったが、このような気体中でも放電実験がおこなわれ、アミノ酸の生成が確認されている²⁾。

放電による実験の一方で、アミノ酸が宇宙から来たとする説もある。これは、1969 年に飛来したマーチソン隕石からアミノ酸が発見されたことに端を発する³⁾。その後の研究で、マーチソン隕石のアミノ酸が、鏡像異性体の片方に偏っていること (ホモキラリティ) も確認され⁴⁾、生命アミノ酸の起源の有力な候補となっている。更には、海洋の熱水噴出孔でアミノ酸が生成したとする説⁵⁾、宇宙線・放射線・紫外線等の照射により生成したとする説⁶⁾、地表への隕石の衝突エネルギーにより生成したとする説⁷⁾ 等、様々な説が提唱されている。直近では「はやぶさ 2」が小惑星から持ち帰ったサンプルにアミノ酸が含まれていることが明らかとなり、地球外の天体でもアミノ酸が生成することが明らかとなっている⁸⁾。

様々な仮説が提案されている生命アミノ酸の起源であるが、現在までに確定的な由来は明らかになっていない。

2. 新たな仮説

筆者らはこれまでの仮説とは異なる新たなアミノ酸の起源を提案した。それは、炭素 14 (^{14}C) をメチル基に含むカルボン酸が、 ^{14}C の β 崩壊により窒素 14 (^{14}N) に核変換することでアミノ酸に遷移するというものである⁹⁾。 ^{14}C は、半減期 5730 年で β^- 崩壊し ^{14}N に核変換する核種である¹⁰⁾。

最も単純な構造のアミノ酸であるグリシン ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$) の場合を例にとると、末端のメチル基に ^{14}C を持つ [^{14}C]プロピオン酸 (カルボン酸の一種、 $[\text{C}^{14}]\text{H}_3\text{CH}_2\text{COOH}$) の ^{14}C が β 崩壊により ^{14}N に核変換することで、グリシニウム (グリシンに水素が付加したも) が生成すると考えられる (図 1 上のフロー)。

^{14}C が β^- 崩壊する際には、最大エネルギー 157 keV の β 線 (電子) と反ニュートリノを放出し、壊変後の核種 ^{14}N はその反跳を受ける (図 2)。受けた反跳に関わらず ^{14}N (アミニルラジカル, $^+\text{NH}_3$) が分子内に留まると、前記のメカニズムによりアミノ酸が生成することになる。一方で、反跳により化合物が開裂した場合には、炭素ラジカルとアミニルラジカルが生じることになる (図 1 下のフロー)。

3. シミュレーションによる検証

β 崩壊によりアミノ酸が生成し得るかどうか、数値計算シミュレーションによる検証をおこなった。シミュレーションでは、 $[\text{C}^{14}]$ プロピオン酸から β 崩壊によりグリシンが生成する確率を計算した。

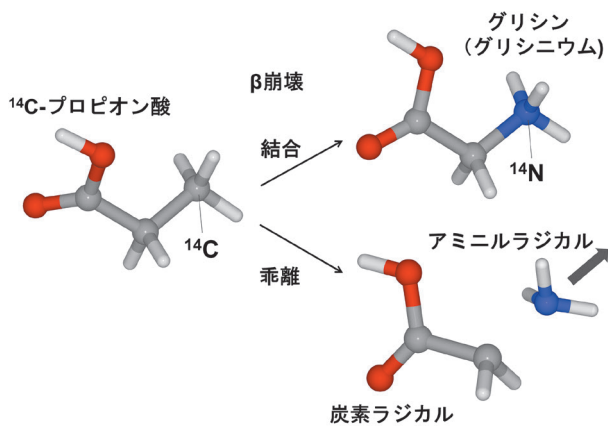


図1 上のフロー：メチル基に ^{14}C を含むプロピオン酸から、 β 崩壊によりグリシン（グリシニウム）が生成する過程、下のフロー：分子が開裂する場合

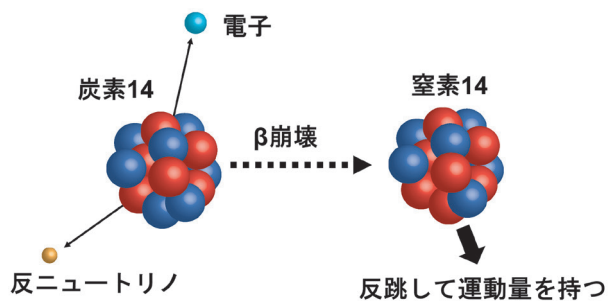


図2 ^{14}C の β 崩壊と核壊変した ^{14}N が受ける反跳

まず、 β 崩壊前後の化合物の形状、及び β 崩壊後に生じると予想されるアミルラジカルと炭素ラジカルの間働く相互作用を量子化学計算により求めた。その後、 β 崩壊によりアミルラジカルが受ける反跳の方向と運動量を初期値として計算した。この初期値は、 β 線と反ニュートリノ放出の角度相関を考慮した上で、乱数によりエネルギーと放出方向を決定し、それによりアミルラジカルが受ける反跳を計算している。 β 崩壊の際の反跳エネルギー分布を図3上に示した。

アミルラジカルの反跳をモンテ・カルロ法の初期値として、分子ポテンシャル内での振る舞いを4次のルンゲ・クッタ法により古典力学計算をおこなった。アミルラジカルの分子内での束縛については、量子化学計算を元にパラメータを決定したモース型のポテンシャル(図3下)を仮定している。

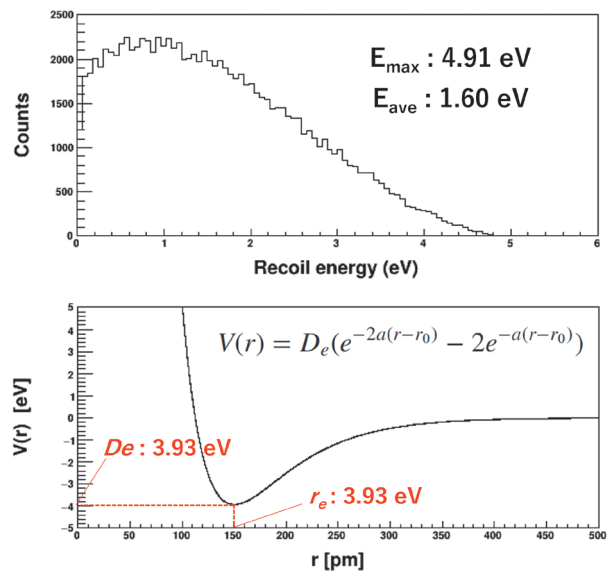


図3 ^{14}C β 崩壊によりグリシニウム (NH_3) が受ける反跳エネルギー(上)とシミュレーションに使用したモース型の束縛ポテンシャル(下)

4. シミュレーション結果

β 崩壊から反跳を受けたアミルラジカルの150 fs間の振る舞いを調べ、軌道の特徴により2つのグループに分けた。1つは軌道が大きく曲がり元の位置付近にアミルラジカルがとどまっているグループであり(図4左)、もう1つは直線的に元の位置から離れていくグループである(図4右)。これらをそれぞれ、アミルラジカルが化合物内にとどまりグリシンを生成するイベントと、乖離してグリシンを生成しないイベントと定義した。軌道が大きく曲がっている事象については、化合物内の他の原子との相互作用により反跳エネルギーを失い、グリシンを形成すると考えられる。

結果として、百万回のモンテ・カルロ試行により、 ^{14}C プロピオン酸の約81%が、 β 崩壊後にグリシンを形成するという結果が得られた⁹⁾。

シミュレーションでは、分子構造の変形、熱振動、 ^{14}C が ^{14}N に核壊変したことによる電子配置の変化等を考慮せず、非常に単純化したモデルを用いている。そこで、グリシニウムの束縛パラメータ(モース・ポテンシャルの形状、深さ)を変化させた場合の、グリシンの生成率も調べた。その結果、ポテンシャルの深さのみにグリシンの生成率は依存しており、仮に深さを半分まで減少させた場合においても、

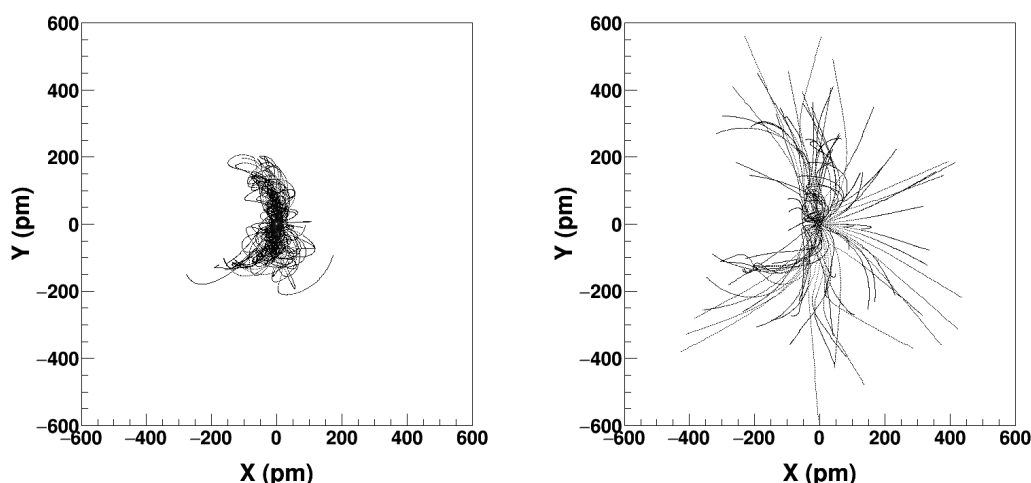


図4 シミュレーションにより得られた反跳を受けたグリシニウム (NH_3) の飛跡
グリシニウムが分子内に留まる場合 (左) と乖離する場合 (右)

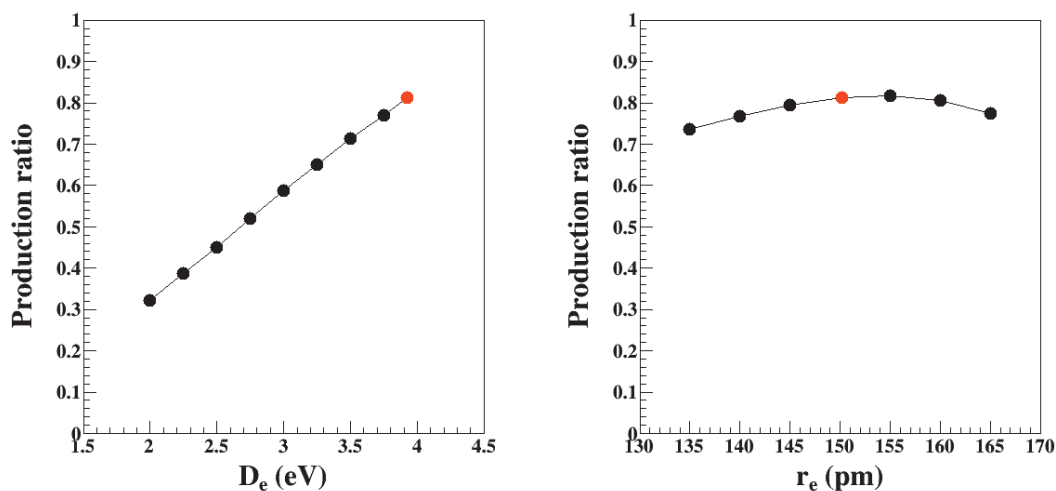


図5 束縛ポテンシャルの深さ (左) と形状 (右) の違いによるグリシンの生成率変化
量子化学計算により求めたパラメータ (図3下) による生成率を赤色で示した

約 32% の確率でグリシンが生成することが分かった (図5)。このことから、溶液中や高温状態等様々な条件下においても、 ^{14}C プロピオン酸からグリシンが生成されることが示唆された。

5. 考察

今回のシミュレーションどおりに、 β 崩壊によりアミノ酸が生成するとしても、それが生命の起源になり得るかどうかには、様々な検討すべき課題がある。

まず、現在の地球の ^{14}C の天然存在比は、 10^{-12} 程度とごく微量である。 ^{14}C は主に宇宙線により生成

されるため、その存在比は惑星環境の変化により変動するが、生命が誕生したとされる 38 億年前における存在比は不明である。また、窒素原子を含まないカルボン酸は、アミノ酸よりも容易に生成すると考えられるが、それでも ^{14}C を含むカルボン酸が生命の起源となるのに十分な量生成し得たかどうかは、 ^{14}C の存在比と合わせて不明である。更に、グリシン以外のアミノ酸も、 ^{14}C を含むカルボン酸から β 崩壊により同様に生成すると考えられるが、生命を構成する 20 種類のアミノ酸がすべて生成し得るかどうか不明である。

これらは、これから答えを出していくべき課題である。

6. 今後に向けて

今回、アミノ酸が β 崩壊により生成する可能性を、簡単なシミュレーションにより確かめた。この成果の意義は、生命の起源にこれまで考慮されていなかった「 β 崩壊」という新たな概念を持ち込んだところにあると考えている。例えば、生命アミノ酸にはホモキラリティがあることが知られているが、 β 崩壊は、物理学における4つの力のうち唯一空間反転対称性を破っている。したがって、生命の起源となるアミノ酸（もしくはその一部）が、 β 崩壊に由来すると、ホモキラリティとの関連も想像に難くない。また、原始生命の誕生には、数あるアミノ酸種の選択的重合は確率的にあり得るか？等、アミノ酸の由来の他にも様々な謎が残されている。これらの問題を解決するには新しい概念の導入が必要かも知れない。

今後、 β 崩壊によるアミノ酸の生成について、更に詳細なシミュレーションを進めると共に、検証実験も計画している。今回の計算が正しいとすると、数10 MBqの ^{14}C プロピオン酸を数か月保管することで、液体クロマトグラフィー質量分析法等高感度の分析技術により、グリシンが検出できると考えられる。この実験には分析化学の知識が必要である。また、 β 崩壊により生成するアミノ酸が生命の起源

になり得たかどうかを検証するためには、 β 崩壊や分子構造についての物理学、太古の地球環境を知るための地球惑星科学、生体のアミノ酸に関する生物学の知識等、広い分野に渡る知見が必要である。筆者らは、様々な知を結集して生命はどこから来たのかという根源的な問いに答えを出していきたいと考えている。

【謝辞】

東京医科歯科大学生体材料工学研究所の丹羽節准教授には、量子化学計算をはじめ多大な協力を頂いた。本研究の一部は、JSPS 科研費 20K12704 の助成を受けて遂行したものである。

参考文献

- 1) S. L. Miller, *Science*, **117**, 528 (1953)
- 2) J. L. Bada, *Chem. Soc. Rev.*, **42**, 2186 (2013)
- 3) K. A. Kvenvolden, *et al.*, *PNAS*, **68**, 486 (1971)
- 4) M. H. Engel, B. Nagy, *Nature*, **296**, 837 (1982)
- 5) R. J.-C. Hennet, *et al.*, *Naturwissenschaften*, **79**, 361 (1992)
- 6) S. L. Miller, H. C. Urey, *Science*, **130**, 245 (1959)
- 7) Y. Furukawa, *et al.*, *Nat. Geo.*, **2**, 62 (2009)
- 8) E. Nakamura, *et al.*, *Proc. Jpn. Acad. Ser. B*, **98**, 227 (2022)
- 9) T. Fukuchi, *et al.*, *JPSJ*, **91**, 064301 (2022)
- 10) F. A-Selove, *Nucl. Phys. A*, **523**, 1 (1991)

((国研)理化学研究所 生命機能科学研究センター)