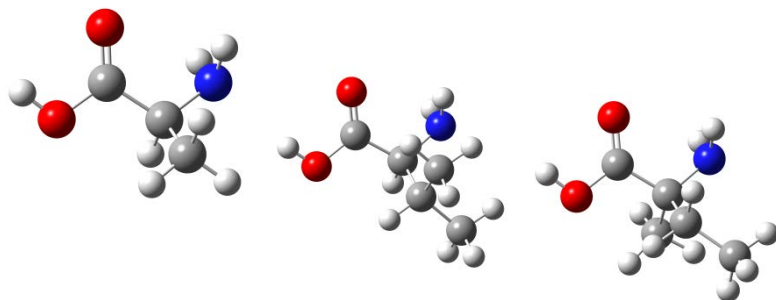
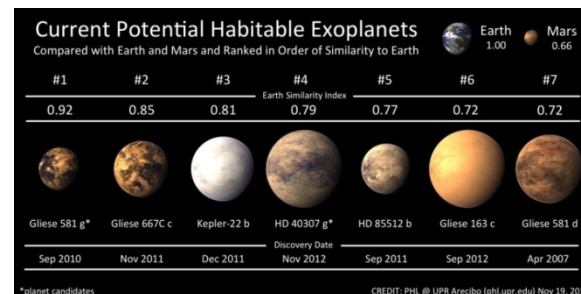




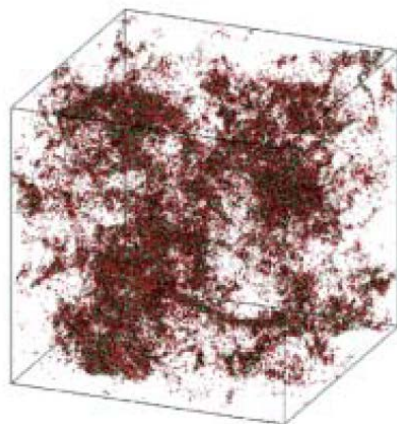
Interstellar Amino Acid



Photosynthesis on Exoplanets

Organization for Collaborative Research on Computational Astrobiology (CAB)

Masayuki Umemura
(Center for Computational Sciences, University of Tsukuba)

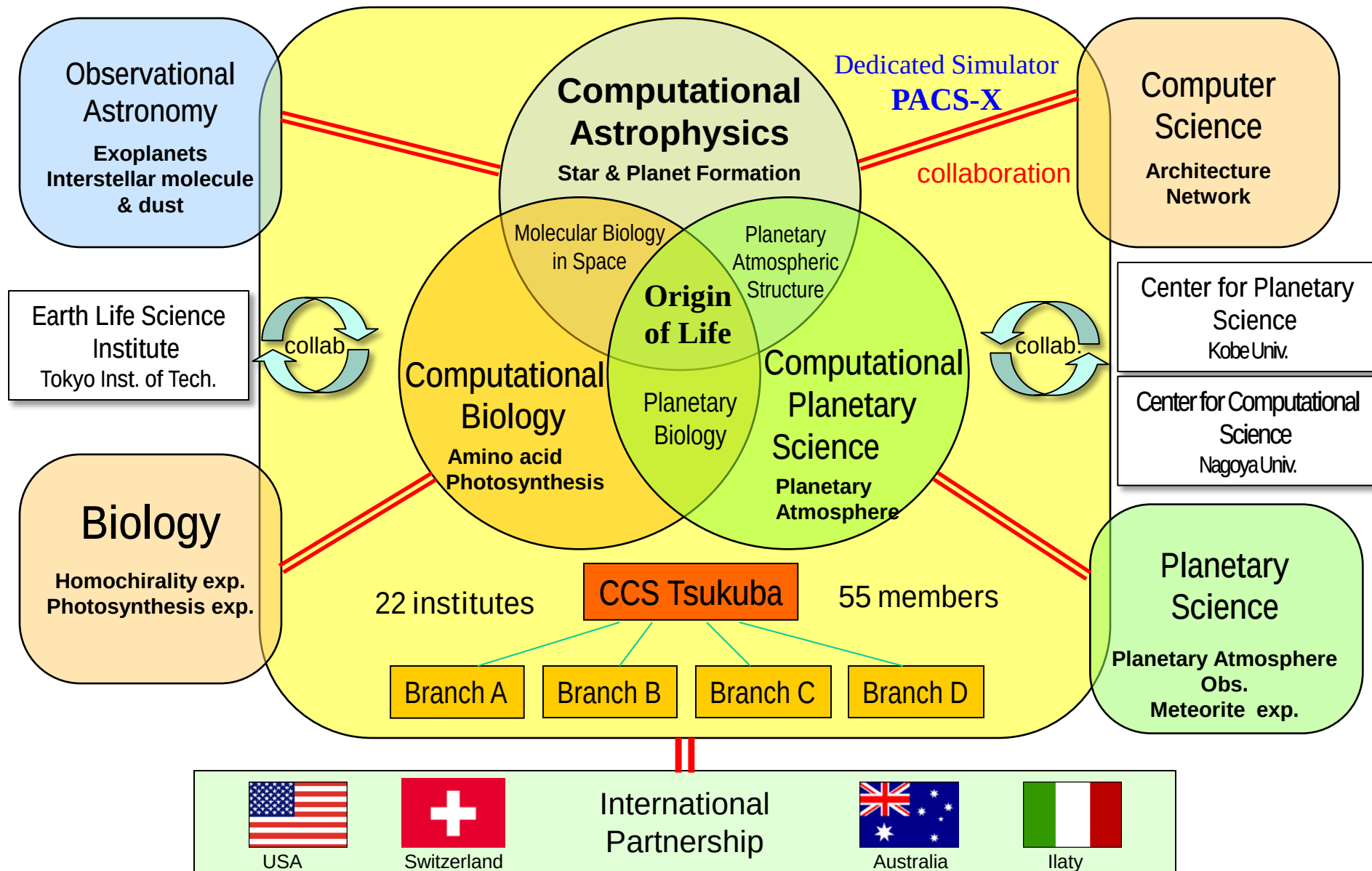


Hydrodynamic & Magnetohydrodynamic Turbulence

Background & Objective

- ◆ In the last decade, the field of “Astrobiology” has attracted a significant deal of attention owing to advanced observations of extrasolar planets as well as interstellar molecules. The computational approach is a powerful tool even for Astrobiology. Such “**Computational Astrobiology**” is a new frontier.
- ◆ This organization aims at establishing **an inter-university organization of “Computational Astrobiology (CAB)”** by exploring key processes related to the origin of life in the universe through *ab initio* (first principle) calculations and large-scale hydrodynamic simulations. This is a multidisciplinary collaboration among the **Computational Astrophysics, Biology, Planetary/Geoenvironmental Science, and Computer Science.**

Organization for Collaborative Research on Computational Astrobiology (CAB)



Members of CAB

22 inst, 55members

(赤字は分野世話人)

分野	氏名	職名	所属	専門分野	email
天文・宇宙分野	梅村 雅之	教授	筑波大学 計算科学研究センター	計算宇宙物理	umemura@ccs.tsukuba.ac.jp
	牧野 淳一郎	教授	東京工業大学大学院 理工学研究科 理学研究流動機構	計算宇宙物理／計算機工学	makino@mail.jmlab.jp
	松元 亮治	教授	千葉大学大学院 理学研究科	宇宙物理学	matumoto@astro.s.chiba-u.ac.jp
	富阪 幸治	教授	国立天文台 理論研究部	シミュレーション天文学	tomisaka@th.nao.ac.jp
	小久保 英一郎	教授	国立天文台 理論研究部	惑星系形成	kokubo@th.nao.ac.jp
	森 正夫	准教授	筑波大学 数理解物質系／計算科学研究センター	計算宇宙物理	nmori@ccs.tsukuba.ac.jp
	中本 泰史	准教授	東京工業大学大学院 理工学研究科 地球惑星科学専攻	天文学・惑星科学	nakamoto@geo.titech.ac.jp
	松本 倫明	教授	法政大学 人間環境学部	天体物理学	matsu@hosei.ac.jp
	町田 正博	准教授	九州大学大学院 理学研究院 地球惑星科学部門	星・惑星形成	machida.masahiro.018@m.kyushu-u.ac.jp
	相川 祐理	准教授	神戸大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻	星・惑星系形成	aikawa@kobe-u.ac.jp
生命・物質分野	白石 賢二	教授	名古屋大学大学院 工学研究科 計算理工学専攻	計算物質・生命	shiraishi@cse.nagoya-u.ac.jp
	矢花 一浩	教授	筑波大学 数理解物質系／計算科学研究センター	計算物質	yabana@nucl.ph.tsukuba.ac.jp
	岡田 晋	准教授	筑波大学 数理解物質系／計算科学研究センター	計算物質	sokada@comas.frsc.tsukuba.ac.jp
	庄司 光男	助教	筑波大学 数理解物質系／計算科学研究センター	計算生命	mshoji@ccs.tsukuba.ac.jp
	神谷 克政	助教	筑波大学 数理解物質系 物理学域	計算物質	kkamiya@comas.frsc.tsukuba.ac.jp
	栢沼 愛	助教	筑波大学 計算科学研究センター	計算生命	kayanuma.megumi.fw@u.tsukuba.ac.jp
	梅田 宏明	研究員	筑波大学 計算科学研究センター	計算物質	umeda@ccs.tsukuba.ac.jp
	中野 雅由	教授	大阪大学 基礎工学部	計算物質・生命	mnaka@cheng.es.osaka-u.ac.jp
	重田 育照	准教授	大阪大学 基礎工学部	計算物質・生命	shigeta@cheng.es.osaka-u.ac.jp
	岸 亮平	助教	大阪大学 基礎工学部	計算物質・生命	rkishi@cheng.es.osaka-u.ac.jp
	小林 憲正	教授	横浜国立大学大学院 工学研究科 生命科学部	生命科学	kkensei@ynu.ac.jp
	高須 昌子	教授	東京薬科大学 生命科学部	生命科学	takasu@toyaku.ac.jp
	宮川 毅	助教	東京薬科大学 生命科学部	生物物理	takeshi@toyaku.ac.jp
	平田 聡	教授	イリノイ大学アーバナ・シャンペーン校化学科	理論化学	sohirata@illinois.edu
	Boero Mauro	教授	IPCMS - Departement de Chimie et des Materiaux Inorganiques (DCMI)	計算物質・生命	mauro.boero@ipcms.unistra.fr
	高橋 淳一	特任研究員	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	生命科学・放射光化学	jitaka@ba2.so-net.ne.jp
	篠島 弘幸	教授	久留米高専 一般科目(理科系)	光エレクトロニクス・計算物理	shinojima@kurume-nct.ac.jp
	中川 和道	教授	神戸大学大学院 人間発達環境学研究科	放射光物性	nakagawa@kobe-u.ac.jp
	田中 真人	主任研究員	産業技術総合研究所 計測フロンティア研究部門	量子ビーμ	masahito-tanaka@aist.go.jp
	篠島 弘幸	教授	久留米高等工業専門学校一般科目	計算生命	shinojima@kurume-nct.ac.jp
惑星科学分野	柴田 裕実	特任研究員	大阪大学 産業科学研究所附属ナノテクノロジーセンター	物質科学	shibadanuki@mac.com
	井田 茂	教授	東京工業大学大学院 理工学研究科 地球惑星科学専攻	惑星物理学	ida@geo.titech.ac.jp
	中川 義次	教授	神戸大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻	惑星形成論	yoshi@kobe-u.ac.jp
	林 祥介	教授	神戸大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻	地球惑星科学	shosuke@gfd-dennou.org
	高橋 芳幸	助教	神戸大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻	地球惑星科学	yot@people.kobe-u.ac.jp
	田中 博	教授	筑波大学 生命環境系／計算科学研究センター	地球環境	tanaka@ccs.tsukuba.ac.jp
	生駒 大洋	准教授	東京大学大学院 理学系研究科 地球惑星科学専攻	惑星科学・惑星大気	ikoma@eps.s.u-tokyo.ac.jp
	阿部 豊	准教授	東京大学大学院 理学系研究科 地球惑星科学専攻	惑星科学・惑星大気	ayutaka@eps.s.u-tokyo.ac.jp
	河原 創	助教	東京大学大学院 理学系研究科 地球惑星科学専攻	惑星科学・惑星大気	kawahara@eps.s.u-tokyo.ac.jp
	倉本 圭	教授	北海道大学大学院 理学研究科 宇宙物理学専攻	惑星科学・惑星大気	keikei@ep.sci.hokudai.ac.jp
	石渡 正樹	准教授	北海道大学大学院 理学研究科 宇宙物理学専攻	気候力学・惑星流体力学	momoko@ep.sci.hokudai.ac.jp
	小高 正嗣	助教	北海道大学大学院 理学研究科 宇宙物理学専攻	惑星気象学	odakker@ep.sci.hokudai.ac.jp
	石原 卓	准教授	名古屋大学大学院 工学研究科 附属計算科学連携教育研究センター	流体力学(乱流)	ishihara@cse.nagoya-u.ac.jp
	竹広 真一	准教授	京都大学 数理解析研究所	惑星物理学	takepiro@gfd-dennou.org
	石岡圭一	准教授	京都大学 理学研究科 地球惑星科学専攻	地球惑星	ishioka@gfd-dennou.org
	中島健介	助教	九州大学 理学部 地球惑星科学専攻	地球惑星	kensuke@geo.kyushu-u.ac.jp
	西沢誠也	研究員	理化学研究所 計算科学研究機構	地球惑星	seiya@gfd-dennou.org
計算機工学分野	佐藤 三久	教授	筑波大学 システム情報系／計算科学研究センター	計算機工学	msato@cs.tsukuba.ac.jp
	朴 泰祐	教授	筑波大学 システム情報系／計算科学研究センター	計算機工学	taisuke@cs.tsukuba.ac.jp
	児玉 祐悦	教授	筑波大学 システム情報系／計算科学研究センター	計算機工学	kodama@cs.tsukuba.ac.jp
	高橋 大介	教授	筑波大学 システム情報系／計算科学研究センター	計算機工学	daisuke@cs.tsukuba.ac.jp
	塙 敏博	准教授	筑波大学 システム情報系／計算科学研究センター	計算機工学	hanawa@ccs.tsukuba.ac.jp
	中里直人	准教授	会津大学 コンピュータ理工学部	計算天文学／HPC	nakasato@u-aizu.ac.jp

Origin of Life

Collaboration of Astrophysics, Biophysics, and Planetary Science

Astrophysics

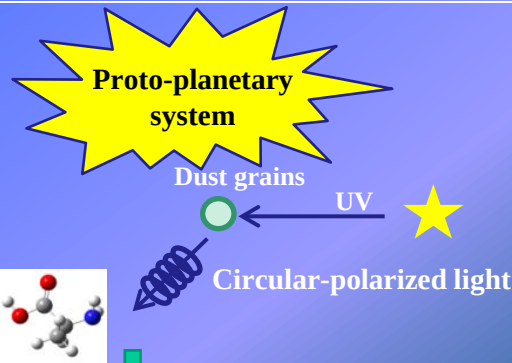
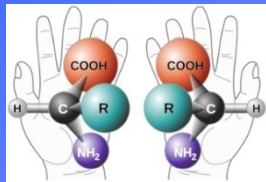
Biophysics

Planetary Science



Cosmic origin of the homo-chirality of amino acids

Enantiomeric excess of Amino Acid by interstellar circularly-polarized light



Amino acid

Enantiomeric excess



Meteorite

(Murchison meteorite)

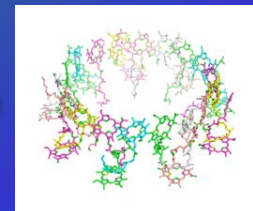
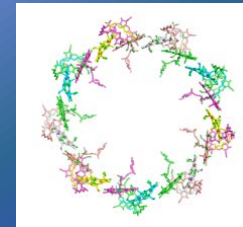
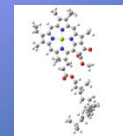
Earth

Photosynthesis on extra-solar planets

Biomarker of planets around G, K, M stars

TDDFT calculations of chlorophylls

Chlorophyll dynamics
QM/MM



Current Potential Habitable Exoplanets

Compared with Earth and Mars and Ranked in Order of Similarity to Earth

#1	#2	#3	#4	#5	#6	#7
0.92	0.85	0.81	0.79	0.77	0.72	0.72
Gliese 581 g*	Gliese 667C c	Kepler-22 b	HD 40307 g*	HD 85512 b	Gliese 163 c	Gliese 581 d
Sep 2010	Nov 2011	Dec 2011	Nov 2012	Sep 2011	Sep 2012	Apr 2007

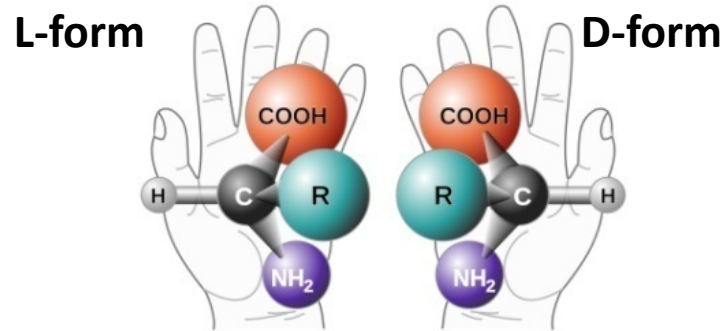
*planet candidates

CREDIT: PHL @ UPR Arcibo (phl.upr.edu) Nov 19, 2012

What is L-form amino acid excess?

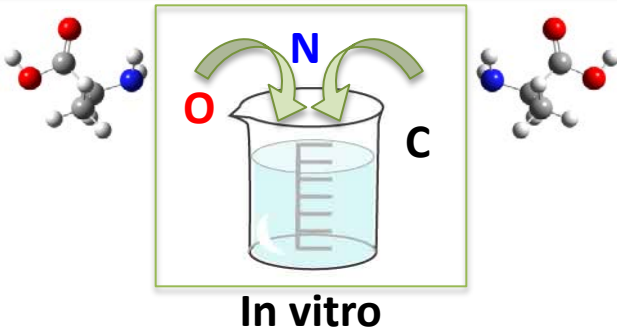
Enantiomer

Amino acid has two different conformations called enantiomer.

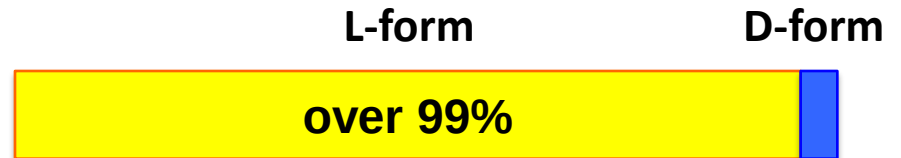


Louis Pasteur (1822-1895)

Proportions created in Laboratory



Proportions generated in living organisms



In vivo



e.g. D-glutamic acid is tasteless.

The origin of chirality for amino acids remains as one of the big mysteries for the origin of life.

Discovery of Amino acids and Enantiomeric Excess in Meteorites

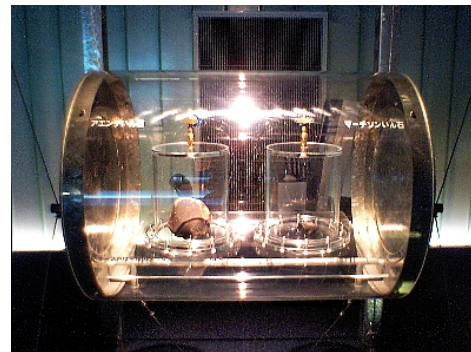
Murchison meteorite

Australia in 1969

Engel & Macko, Nature 1997, 389, 265

Pizzarello & Cronin , 2000, Geochimica et Cosmochimica Acta, 64, 329

Amino acids like glycine, alanine, valine, and isovaline, which forms proteins, are detected in the Murchison meteorite. Also, the excess of L –form amino acids (enantiomeric excess) was found. The isotope ratio is different from that on the earth (cosmic origin).



Experiments

Asymmetric photoreaction of Amino Acids

Meierhenrich et al. 2010, Angew. Chem. Int. Ed, 49, 7799

The irradiation of circularly-polarized light causes the enantiomeric excess of amino acids.

Light Source:

UVSOR-II (Oakazaki, Japan)

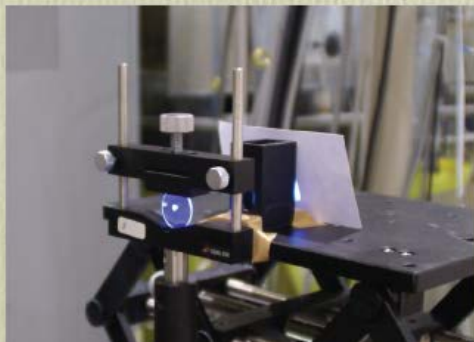
Free Electron Laser (FEL)

Circularly Polarized Light (CPL)

Polarization Purity > 98%

Wavelength $\lambda = 215 \sim 6 \text{ nm}$

Total Dose $\sim 10^{16} \text{ eV}$ (2~10 mWhour)



Irradiation of circular-polarized light on amino acids (J. Takahashi et al.)

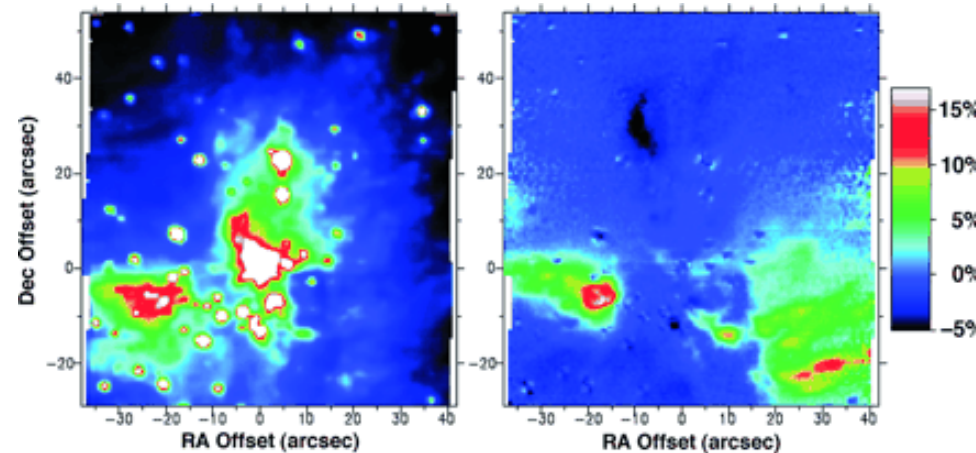
Discovery of Circularly-Polarized Light In Star-forming Regions

Bailey et al., 1998, Science, 281, 672

3.9-m Anglo-Australian Telescope

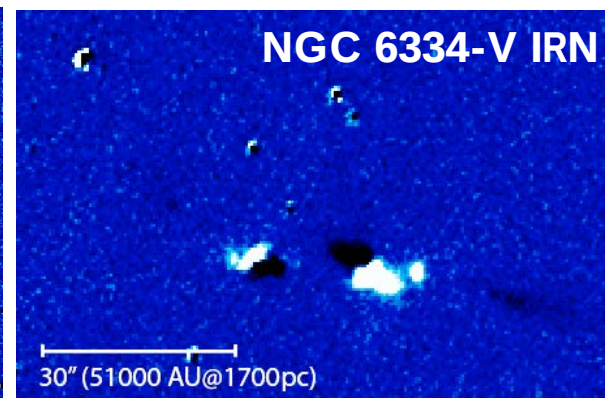
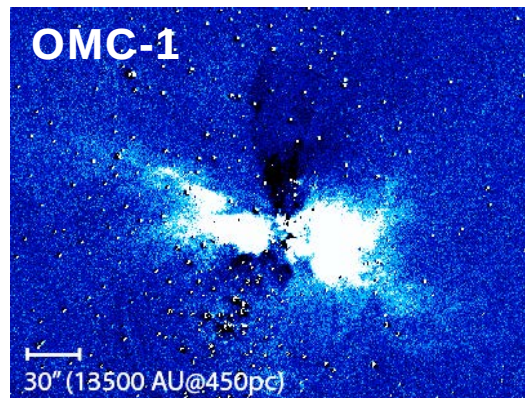
Intensive circularly-polarized infrared light was detected in Orion-molecular cloud -1.

Fig. 1. Circular polarization image of the OMC-1 star-formation region in Orion at $2.2\ \mu\text{m}$ (K_n band). (Right) Percentage circular polarization ranging from -5% (black) to $+17\%$ (white). Polarization accuracy ranges from about 0.1% in the brighter regions to 1% in the fainter regions. By convention, positive polarization means that the electric vector is seen to rotate counterclockwise in a fixed plane by an observer looking at the source. (Left) The total IR intensity. The bright source at coordinates (0, 0) is the Becklin-Neugebauer object. The size of a typical protostellar disk (~ 100 astronomical units) is less than 1 arc sec at the 450 pc distance of OMC-1 and therefore much smaller than the observed polarization structure.



Tamura et al. 2014

Higher and more **extensive** circular polarizations with **quadrupolar** patterns in other star forming regions



Cross-cutting research

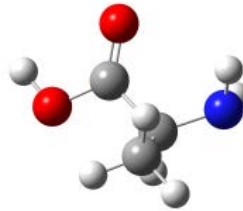
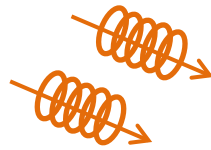
Approach by three different fields

Interstellar
circularly polarized light

Astrophysics

L-form
Amino acid

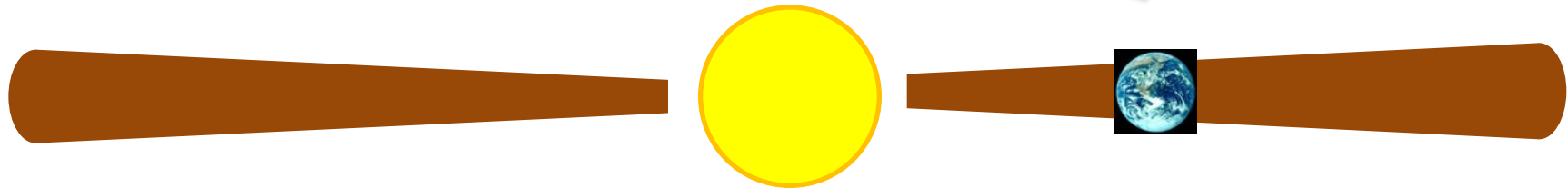
Biology



Meteorite



Materials Science



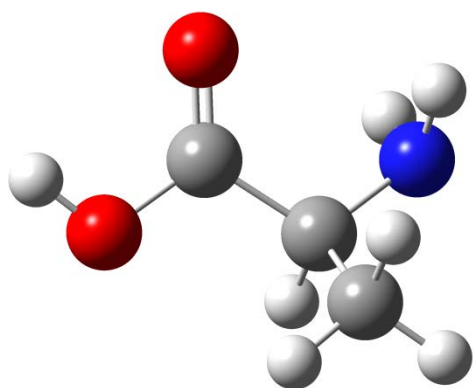
Protoplanetary disk

Choice of amino acids

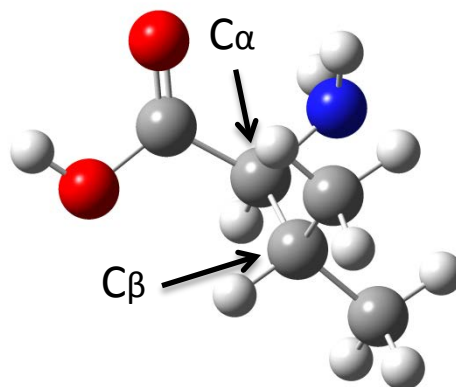
	molar weight [g/mol]	In Murchison meteorite [nmol/g]	Living body	Number of chiral carbon
Alanine	89.09	10.4	○	1
Valine	117.15	8.0	○	1
Isovaline	117.15		×	1

[M. H. Engel *et. al.*, *Nature* **389**, 265 (1997)]

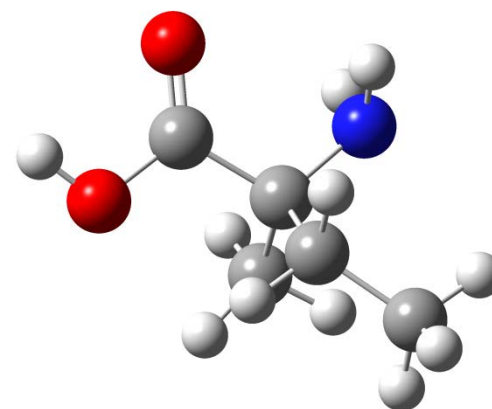
Stable structures of the amino acids in ISM



Alanine



Valine



Isovaline

Computational Method

Time-dependent Kohn-Sham equation is solved

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta + v_{eff}(r, t) \right] \phi_i(r, t) = i \frac{\partial \phi_i(r, t)}{\partial t}$$

effective potential: $v_{eff} = v(r, t) + \int \frac{\rho(r', t)}{|r - r'|} dr' + \mu_{XC}(r, t)$

exchange-correlation term: $\mu_{XC}(r, t) \equiv \frac{\delta A_{XC}[\rho(r, t)]}{\delta \rho(r, t)}$

Electron density: $\rho(r, t) = \sum_i |\phi_i(r, t)|^2$

Oscillator Strength

$$f_{(g \rightarrow n)} = \frac{2}{m\hbar\omega_{(g \rightarrow n)}} [\langle \Psi_g | \mu_{ele} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \mu_{ele} | \Psi_g \rangle]$$

$$\mu_{ele} = -\sum_i r_i + \sum_M Z_M R_M$$

ignored by Born-Oppenheimer approx.

$$\mu_{mag} = -\frac{1}{2} \sum_i r_i \times p_i + \sum_M \left(\frac{Z_M}{2M_M} \right) R_M \times P_M$$

r_i, p_i : position and momentum of electron i

Z_M, M_M, R_M, P_M : charge, mass, position,
and momentum of atom M

m, ω : mass and frequency of electron

Circular Dichroism (CD) Spectra

CD shows the difference of absorption intensity between L-CPL and R-CPL. It depends on both molecule structure and wavelength of light.

$$R_{(g \rightarrow n)} = \text{Im}[\langle \Psi_g | \mu_{ele} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \mu_{mag} | \Psi_g \rangle]$$

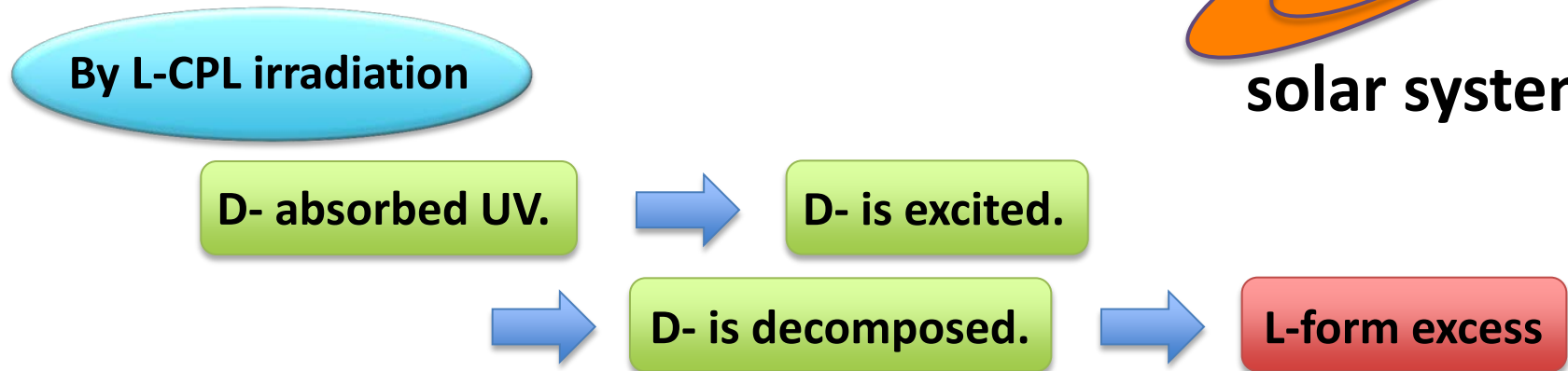
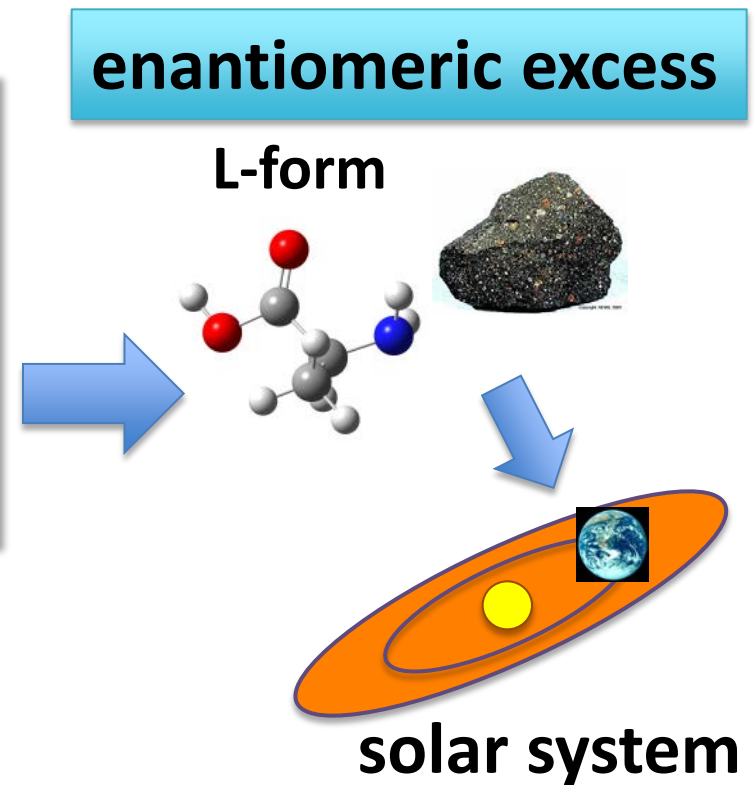
CD is also expressed as below.

$$\Delta A = (\Delta \epsilon) c l$$

$$\Delta \epsilon = \epsilon_{left} - \epsilon_{right}$$

ϵ [cm²/mol] : molar absorptivity

We have found that Alanine, Valine, Isovaline commonly show the negative values of Circular Dichroism (CD) around 120nm. That means, if left circularly-polarized light irradiates Amino Acids, D-form ones are selectively destroyed. (A mirrored world of life may exist in our galaxy.)



Turbulence-Particle Interaction in a Protoplanetary Disk

U Tsukuba: Umemura, Yoshida

Nagoya U.: Shiraishi, Ishihara, Yoshimatsu, Okamoto, Araidai

TiTech: Nakamoto

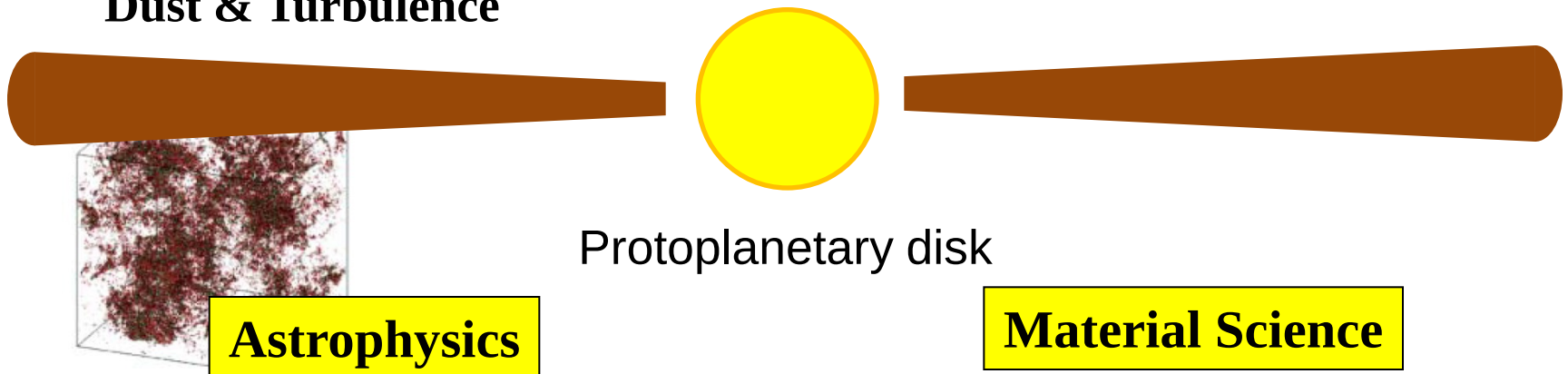
A Standard Scenario of Planet Formation

Dust grains (μm) $\rightarrow$ Coagulation of grains $\rightarrow$ Planetesimal $\rightarrow$ Protoplanet $\rightarrow$ Planet

A difficulty

The differential rotation of a protoplanetary disk generates the turbulence, which prevents dust grains from coagulation. Thus, the formation of planetesimals is thought to be hindered.

Dust & Turbulence



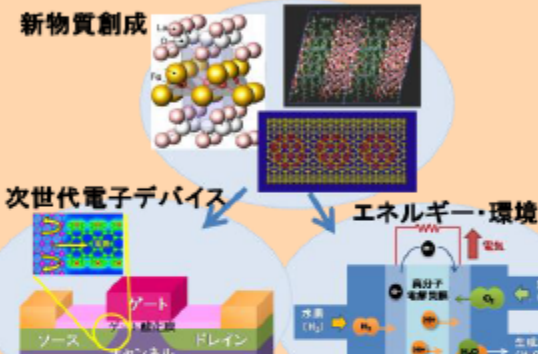
Five strategic areas of SPIRE (Strategic Programs for Innovative Research) for K computer

Life science/Drug
manufacture



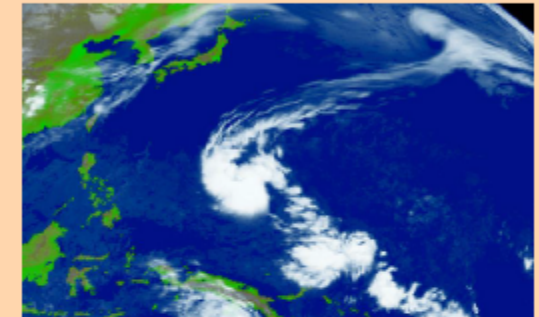
Toshio YANAGIDA
(RIKEN)

New material/energy
creation



Shinji TSUNEYUKI
(University of Tokyo)

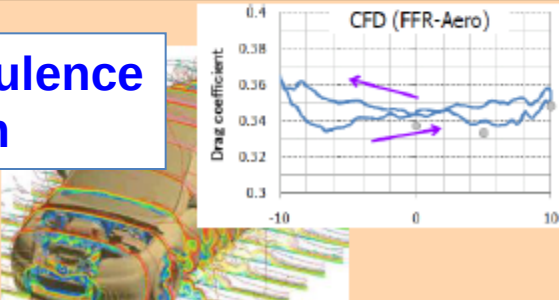
Global change prediction
for disaster
prevention/mitigation



Shiro IMAWAKI
(JAMSTEC)

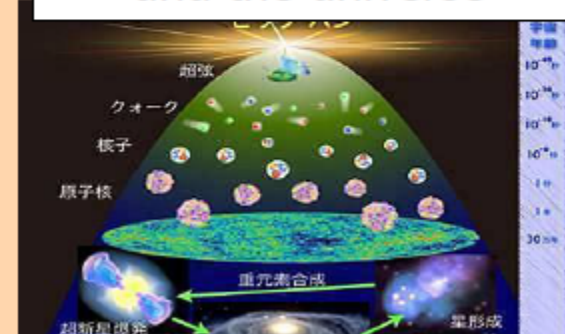
Monodukuri
(Manufacturing technology)

**Turbulence
Team**



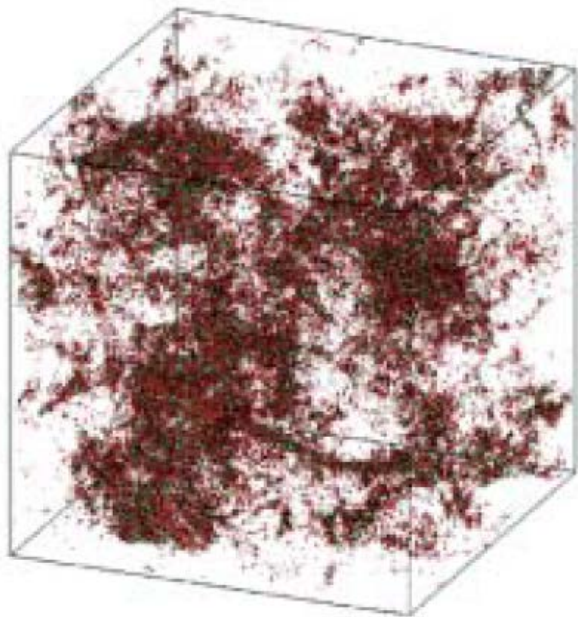
Chisachi KATO
(University of Tokyo)

The origin of matter
and the universe

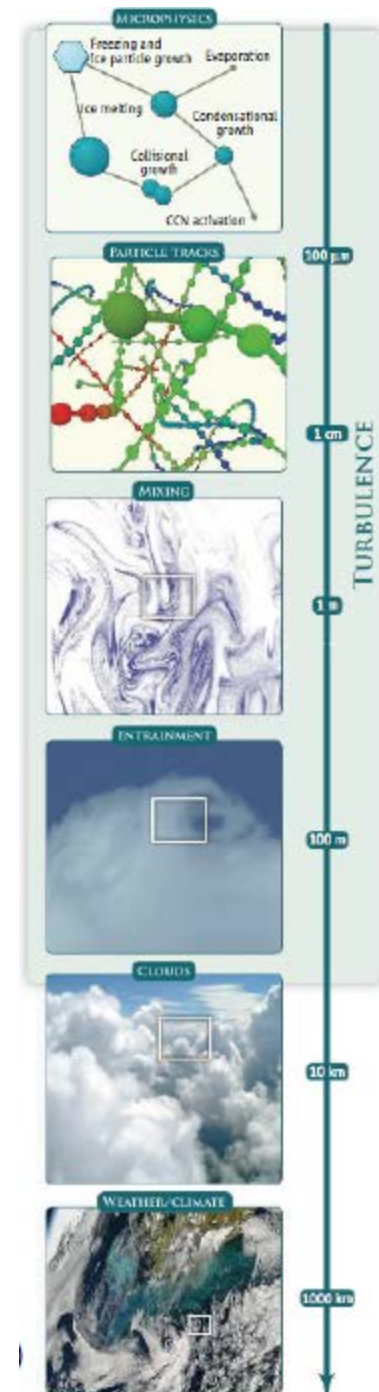


Shinya AOKI
(University of Tsukuba)

Turbulence World

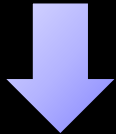


4096³ Simulation
with K computer



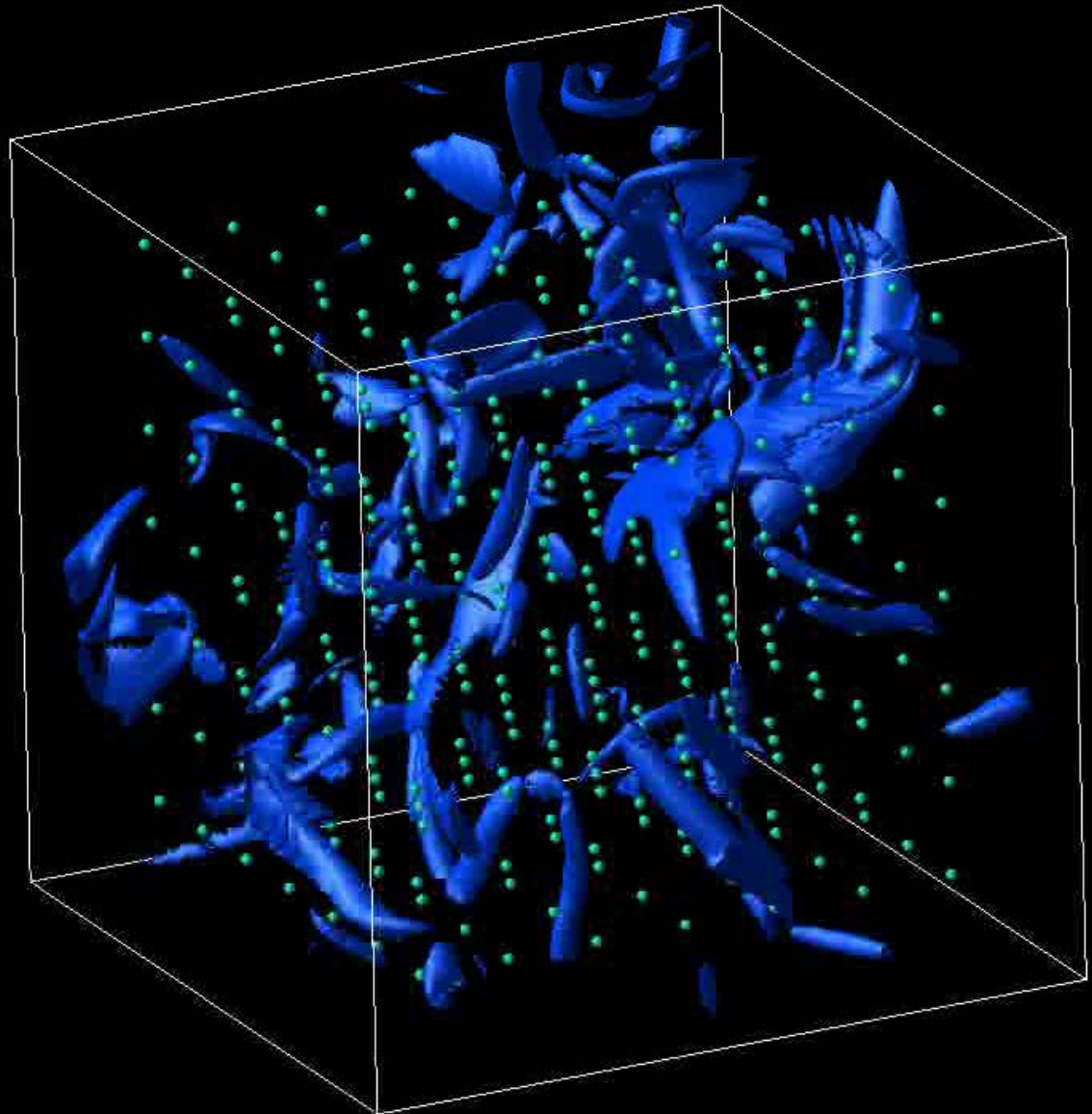
Interaction of Turbulence with Inertial Particles

Grids= 256^3
Re=320



> 4096^3
with K computer

Forward cascade &
inverse cascade



MOU

- **Center for Computational Science
in Nagoya University**
- **Earth-Life Science Institute (ELSI)
in Tokyo Institute of Technology**
- **Center for Planetary Science (CPS)
in Kobe University**

Summary

- ◆ “**Computational Astrobiology**” is a new frontier.
- ◆ This organization aims at establishing **an inter-university organization of “Computational Astrobiology (CAB)”**
- ◆ At present, 55 researchers from 22 institutes are participating in the CAB, which was formed at the initiative of the CCS, University of Tsukuba.
- ◆ This is a multidisciplinary collaboration among the **Computational Astrophysics, Computational Biology, Computational Planetary/Geoenvironmental Science, and Computer Science**.
- ◆ These research efforts are targeted on the potentials of interstellar molecular biology, planetary biology, and the astrophysics of planet formation.