

## 天文学と化学の間で

—実験室分光による星間分子の研究：C<sub>3</sub>H, C<sub>4</sub>H の分光と星間での発見—

山 本 智\*

## 1. はじめに

どうしてまた天文月報に化学の話が登場するのか、不思議に思われる方も少なくないと思います。一般に天文学と化学はずいぶん違う分野のように思われがちですが、歴史的にも、また現在においても、とても密接な関係があります。そして、両者を結びつける上で原子分子分光学が大きな役割を果しているのです。

ヘリウムは水素の次に宇宙存在度の大きい元素です。イギリスの天文学者 Lockyer は、太陽の紅炎光を分光する際に見られる未知のスペクトル線をもとに、はじめてこの元素の存在を示唆しました。1871 年のことです。そしてイギリスの化学者 Ramsay は、1895 年にヘリウムを地上の岩石（クレープ石）から分離することに成功し、元素として確立しました。分離したヘリウムからは、太陽で見つかったものと同じスペクトルが観測されたのです。原子や分子の出すスペクトル線の波長はそれぞれの原子、分子に固有なので、どんなに遠く離れていても、そこにどんな原子、分子が存在するかがわかります。ヘリウムの発見は、分光学を通して天文学と化学が結びついたひとつの例と言えるでしょう。

## 2. 星間分子への道

大学院博士課程の頃は、私は、東京大学化学教室の朽津耕三先生の指導のもとで、筑波にある化学技術研究所の松村知先生の研究室に通って、マイクロ波と赤外の分光実験をやっていました。天文学とはおよそ関係のないホスゲンや三フッ化ほう素のスペクトル測定に熱中していましたが、その時はじめて、宇宙にある分子からの電波（マイクロ波領域の回転スペクトル）が電波望遠鏡で観測されているのを知りました。なんでも、長野県の野辺山に大きい望遠鏡があって、正体不明のスペクトル線も多数見つかったとのことでした。そのなかで最も注目されていたのが、45379 MHz（波長 6.6 mm）の強いスペクトル線（U 45379）で、いったいどんな分子がこのスペクトル線を出しているのか、マイクロ波分光学をやっている研究者の間でも大変な話題になっていました。その時は、後にこの未同定線の解決に加わり、さらに、それを使って暗黒星雲の観測をすることになるとは夢にも思いませんでした。

博士課程を終えた後、齋藤修二先生が名古屋に来ないかと声をかけて下さり、名古屋大学に赴任しました。そ

こで、齋藤さんと一緒にミリ波、サブミリ波の分光器を作りました。齋藤さんは当時から星間分子の分光をめざしておられました。化学的に安定な分子については、もうすでにひととおり世界中で捜しつくされておられ、新しく見つかる星間分子はフリーラジカルや分子イオンといったいわゆる短寿命種がほとんどになっていました。このような分子はおもに吸収セルの中でガスを放電して生成します。しかし、実験室条件では寿命が長くてもミリ秒くらいしかないので、セルの中に高い濃度で生成することができません。従って、そのような分子のスペクトルは分光器の感度が低いと検出できないことになります。私たちは分光器の感度に最大の関心をはらい、周波数逡倍器と検出器を導入して分子の吸収係数が大きいサブミリ波領域で高感度の分光器を実現しました。この分光器を用いて、初めは電子励起状態にある分子の分光に明け暮れていました。この間、一酸化炭素の第 2 電子励起状態の回転スペクトルを初めて検出し、分光器の感度が世界的にみてトップクラスであることを確信できました。

星間分子への道は以外なところから開かれました。1987 年の 1 月に、齋藤さんと当時分子研におられた川口建太郎さんと私とで CS<sup>+</sup> イオンの回転スペクトルを捜していたときに、偶然に CCS ラジカルのスペクトルが見いだされました。そして、分子定数を求めて、全ての遷移を計算してみると、驚いたことに U 45379 がこの分子のスペクトル線であることがわかったのです。また、C<sub>3</sub>S のスペクトルも実験室の分光で検出し、さらに星間分子としても確認しました。星間分子雲では炭素が直線状につながった“炭素鎖分子”が特徴的に存在していることが知られています。それまで、HC<sub>2n+1</sub>N ( $n=0 \sim 5$ ), C<sub>n</sub>O ( $n=1, 3$ ), C<sub>n</sub>H ( $n=1 \sim 6$ ), C<sub>n</sub>N ( $n=1, 3$ ) が見つかっていました。CCS と C<sub>3</sub>S の発見は、硫黄を含む新しい炭素鎖分子の存在を明らかにしたもので、それ以来、私の興味を一気に星間分子の方に変えてしまいました。そして、後で述べるように、CCS のスペクトル線を使った星間分子雲の化学進化の研究へ発展していくこととなります。ここが大きなターニングポイントでした。

3. 環状 C<sub>3</sub>H の発見

私たちの分光器は感度が高いために、広い周波数範囲をすばやくみることができると強みがありました。この特性を生かして、C<sub>3</sub>H ラジカルの振動励起状態のスペクトル

\* 名大理 Satoshi Yamamoto: Between Astronomy and Chemistry

ルを捜している時に、 $C_3H$  のスペクトル線とは生成条件の異なるスペクトル線群を見つけました。これらのスペクトル線は比較的まばらで、240~330 GHz もの広い範囲に僅か9組の二重線があるだけでした。このようにどんな分子から来ているか判らないスペクトル線を帰属することは、それほど容易ではありません。 $C_3H$  ラジカルにはそれまで直線型 (CCCH) のものしか知られていませんでした。まさか炭素骨格が三角型のものがあるとは思いませんでしたが、適当に分子構造を見積って回転スペクトルを予想すると、どうもスペクトルパターンを説明できそうです。こうなるとあとは勢いで、実験と計算を繰り返し、検出されたスペクトルを環状の  $C_3H$  ラジカルのもので帰属つけることができました。環状の  $C_3H$  などという分子はこれまで分子科学の分野でもまったく知られていませんでした。私たちは野辺山観測所におられた海部宣男先生にお願いして、45 m 電波望遠鏡を用いて星間分子雲で環状  $C_3H$  を捜しました。そして、牡牛座の暗黒星雲 TMC1 でそのスペクトルをみつけることができました (図1)。

この発見はいろいろな点で重要な意味をもっていました。同じ化学式をもつ直線と  $C_3H$  比べると、環状  $C_3H$  は 0.8 eV も不安定です。それにもかかわらず TMC1 という冷たい暗黒星雲では両者は同じ位の量だけ存在しています。TMC1 は温度が 10 K と低いので異性化反応が起こりにくく、不安定な構造異性体でもいったん生成すれば安定に存在できます。このような構造異性体は HCN と HNC が有名で、星間分子雲でも発見されています。環状  $C_3H$  の検出は、構造異性体の重要性を改めて示唆するものでした。最近になって環状  $C_3H_2$  の異性体である  $H_2CCC$  やジアセチレン ( $C_4H_2$ ) の異性体である  $H_2CCCC$  が星間分子として発見され、構造異性体がますます注目されるようになってきました。もうひとつの重要な点は環状分子であるということです。環状  $C_3H$  は環状  $C_3H_2$  に次いで星間分子雲で発見された2番目の環状分子でした。これまで、とくに暗黒星雲では直線の炭素鎖分子が特異的に見つかっていました。しかし、炭素鎖の成長過程で環状分子も同時に生成しているのです。アメリカ国立電波天文台の Mangum らは、最近、環状  $C_3H$  を暗黒星雲でサーベイ観測して、環状  $C_3H_2$  と同様に多くの天体に分布していることを示しました。

環状  $C_3H$  は星間空間で  $C_3H_3^+$  イオンと電子の再結合反応で生成すると考えられています。この再結合反応の生成物は環状  $C_3H$  だけではなく、直線  $C_3H$  や環状  $C_3H_2$  も含まれます。最近、環状  $C_3H_2$  の重水素化物、 $C_3HD$  が星間空間で非常にたくさん存在しており、この分子に高い重水素濃縮が起こっていることが報告されています。そうすると、親イオンの  $C_3H_3^+$  も重水素濃縮

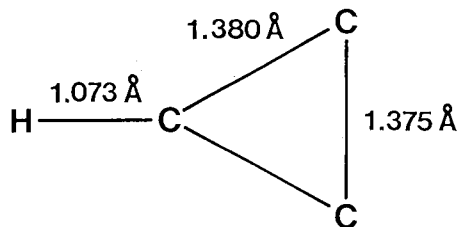
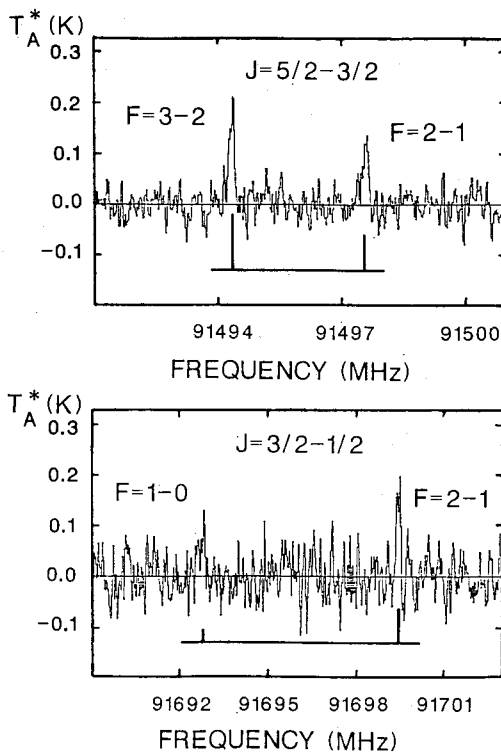


図1 環状  $C_3H$  ラジカルの分子構造と、牡牛座暗黒星雲 TMC1 で検出されたスペクトル ( $2_{12}-1_{11}$  遷移)。スペクトルは電子スピンと回転の相互作用によって  $J=5/2-3/2$  と  $J=3/2-1/2$  に大きく分かれ、さらにそれぞれが水素核の超微細構造によって2本に分裂している。

を起こしていると考えられ、それからできる環状  $C_3H$  も同様に重水素濃縮を起こしている可能性があります。そこで、環状  $C_3D$  のスペクトルを捜そうという話がアメリカ国立電波天文台の Turner さんからあり、実験室で環状  $C_3D$  のスペクトルの帰属を行いました。TMC1 での観測はグリーンバンクの 43 m 鏡を用いて、今年の後半に行われます。

このように、ひとつの分子の発見は、星間化学のいろいろな分野での考え方をええたり、新しい問題を提起することにつながります。私たちは、まだ星間分子の多様な化学的個性のほんの一部を知っているにすぎないので

#### 4. 星のまわりでの分子の振動励起

分子は化学的な個性の他に、物理的な個性をもっています。赤色超巨星 IRC+10216 で発見した  $C_4H$  の振動励起状態のスペクトル線は、振動励起のメカニズムに分子の分光学的性質が深く関与していました。 $C_4H$  は  ${}^2\Sigma$  の電子基底状態をもつ直線の炭素鎖分子で、IRC+10216 のような晩期型星の周辺雲や、暗黒星雲で見つけられています。 $C_4H$  には非常に低い電子励起状態 ( ${}^2\Pi$ ) が存在するために、変角振動が励起した状態では振電相互作用によって  ${}^2\Pi$  電子状態の性質が強く現れます。私たちは、このような分光学的興味から、 $\nu_7$  モードと呼ばれる炭素骨格が“へ”の字に折れ曲がる振動 (振動数は約  $130\text{ cm}^{-1}$ ) の量子数 ( $\nu_7$ ) が 1 と 2 の励起状態のスペクトルを実験室で測定、解析して、分子定数を求めています。

1987 年夏に、スミソニアン天体物理研究所の Thaddeus さんの研究室を訪問したときのことです。この研究室では、私たちと同じように実験室マイクロ波分光をもとに新しい星間分子の発見をめざしており、さきほど出てきた環状  $C_3H_2$  などの検出に成功しています。研究室を案内してもらった後、お茶を飲みながらいろいろ話をしました。私が、 $C_4H$  の振動励起状態のスペクトルを測定していると言うと、彼らは顔を見合わせ、なにやらひそひそやっています。彼らは、 $C_4H$  の振動励起状態のスペクトルらしいものを IRAM の 30 m 鏡で見つけたと言うのです。しかし、振動励起状態のスペクトルならば 2 本組のスペクトルが 2 組現れなければならないのに、1 組しかみつからない。どういうわけだろうと聞かれました。私は、「 $C_4H$  の振動励起状態のスペクトルは大変複雑で、4 本がばらばらにあらわれるはずだから、たぶんあなたたちの見つけたものは  $\nu_7=1$  の振動励起状態ではないだろう。しかし、 $\nu_7=2$  の状態ならば、1 組の 2 重線を与えるはずだから、その可能性がある。帰ったらすぐ調べて連絡する。」と答えて帰国しました。名古屋に戻って分子定数を調べると、彼らのみつけたものが  $C_4H$  の  $\nu_7=2$  状態のものであることが判明しました。 $\nu_7=2$  状態のスペクトルが見つかるのだから、それよりもエネルギーの低い  $\nu_7=1$  状態のスペクトルもあるはずだというわけで、野辺山のライナーベイのデータを調べると、 $\nu_7=1$  のスペクトルが数本確認されました。さっそく Thaddeus さんに電話してこのことを伝え、分子定数を知らせました。数日後、IRAM の Guélin さんから電話がかかってきました。「おまえが Thaddeus に教えた分子定数から周波数を計算したら、IRC+10216 の未同定線が 22 本も帰属できた」というのです。このときは本当にびっくりしました。私たちは Guélin さんと一緒に共同で論文を出すことにしました<sup>2)</sup>。

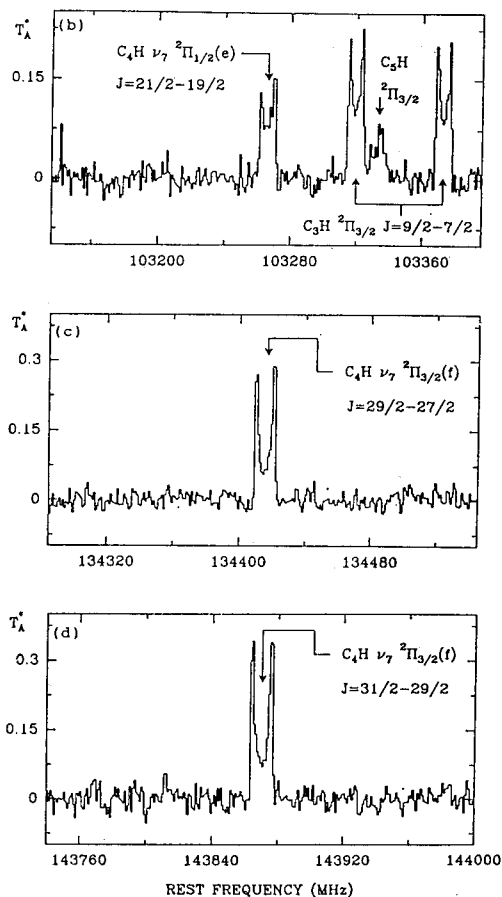


図 2 赤色超巨星 IRC+10216 での振動励起した  $C_4H$  ラジカルスペクトル。ダブルピークをもつプロファイルから、外側の膨張シェルで振動励起が起きていることがわかる。これらは、IRC+10216 での比較的強い未同定線であった。

これまで、IRC+10216 では、HCN, CS, SiS,  $HC_3N$  の振動励起状態のスペクトルが見つかっていました。これらは、いずれも星の中心近くの高温度・高密度領域から出ているものらしく、線幅が細いのが特徴です。一方、 $C_4H$  のスペクトルは、図 2 に示すような明瞭なダブルピークをもち、比較的の外側の膨張シェルから出ていると考えられます。しかし、外側のシェルでは密度・温度が低く、衝突で振動励起することができません。それならどうやって分子が励起しているのか……これが問題になりました。

この機構を探るために、他の炭素鎖分子の振動励起状態のスペクトルを捜しました。まず、直線  $C_3H$  を調べました。この分子は非常に低い振動状態 ( $27\text{ cm}^{-1}$ ) をもつにもかかわらず、45 m 鏡による観測では振動励起状態のスペクトル線を見つけることはできませんでした<sup>3)</sup>。また、大学院生の三上さんは  $C_3N$  の振動励起状態のス

ペクトル線を実験室で明らかにしました。C<sub>3</sub>Nの変角振動の振動数 (179 cm<sup>-1</sup>) は C<sub>4</sub>H よりもやや高い程度ですが、IRC+10216 では C<sub>3</sub>N のスペクトルは見られませんでした<sup>4)</sup>。どうも、C<sub>4</sub>H だけが特異に振動励起しているようです。

C<sub>4</sub>Hは非常に低い電子励起状態をもちます。エネルギー差はおおよそ 500 cm<sup>-1</sup> と推定されます。そのため、中心星の赤外光によって電子励起状態に励起されることが出来ます。このような電子遷移の遷移モーメントは振動準位の間の遷移モーメントよりも1桁以上大きいので電子励起は大変効率よく起こります。そして、電子励起状態に上がった分子はすぐに緩和して電子基底状態に戻りますが、そのとき、一部が振動励起状態に落ちます。このような振動励起の機構を考えてモデル計算を行なうと C<sub>4</sub>H の振動励起状態の分子の分布を説明できることがわかりました。また、C<sub>3</sub>N や C<sub>3</sub>H で振動励起しないことも理解できます。C<sub>3</sub>N や C<sub>3</sub>H の電子状態は可視光領域にあり、中心星からの赤外光では励起できないからです。C<sub>4</sub>H 分子の電子状態の特異性が IRC+10216 での振動励起のスペクトルを生み出しているのです。

### 5. 暗黒星雲の化学進化—これからの道

一つの分子に着目して、その星間化学的性質や励起過程を調べるのも面白いのですが、個々の分子雲の化学組成に着目すると、分子の天文学的意味が見えてきます。はじめのほうで述べた CCS という分子は、暗黒星雲で比較的強いスペクトル線を与えるので、いろいろな暗黒星雲で観測を行うことができます。1987年の夏に、野辺山観測所におられた鈴木博子さんがそのようなサーベイ観測をはじめられました。どのくらいの暗黒星雲でこの分子のスペクトルが見えるのか楽しみで、観測に一緒させていただきました。観測では 49 個の暗黒星雲について、CCS, HC<sub>3</sub>N, HC<sub>5</sub>N とアンモニア (NH<sub>3</sub>) のスペクトルを同時に受信しました。すると、観測する暗黒星雲ごとにそれらのスペクトル線の強度が相対的に異

なるのです。つまり、CCS は強いが NH<sub>3</sub> は弱いところや、逆に CCS は弱いが NH<sub>3</sub> が強いところがあることがわかりました (図3)。両方の分子のスペクトルはともに水素分子密度にして 10<sup>4</sup> cm<sup>-3</sup> 程度の比較的密度の高い部分から出ています。それにもかかわらず強度比が暗黒星雲ごとに違うのは、化学組成が違っていると考えるのが最も自然でしょう。これは化学の立場から見ると暗黒星雲の化学分析に他なりません。化学組成は暗黒星雲のどのような情報を担っているのか—大きい問題にぶつかりました。

これまで、暗黒星雲の化学組成は TMC1 や L134N という“典型的”な暗黒星雲で詳しく調べられてきました。この二つの暗黒星雲の化学組成が大きく異なっていることは以前から指摘されていましたが、その原因についてはそれぞれの天体の特殊性におしつける考え方が一般的でした。一方、他の数多くのコアについて、化学組成を系統的に調べる研究はこれまでまったく行われていませんでした。暗黒星雲の化学分析は、暗黒星雲をみる新しい眼となる可能性をもっています。密度や温度といった物理状態では区別できない何かを表しているからです。

しかし、ここで私たちは大変大きな悲しみと打撃を受けました。このプロジェクトを推進していた鈴木さんが1987年11月に自動車事故で亡くなられたのです。どうしようもない悲しみの中で、なんとか仕事を完成させようという模索が始まりました。はじめは、化学組成と雲の構造に関係があるのではないかと考え、そのような観測もしてみました。しかし、暗黒星雲の大きさはどれも似たりよったりで、化学組成との強い関連はみられませんでした。NH<sub>3</sub> は星形成領域に多いことから (図4)、星形成の活動性がその原因であると考えてみました。これは NH<sub>3</sub> の増加をある程度説明できますが、CCS の減少を合理的に説明することができません。そうこうするうちに、2年が過ぎてしまいました。

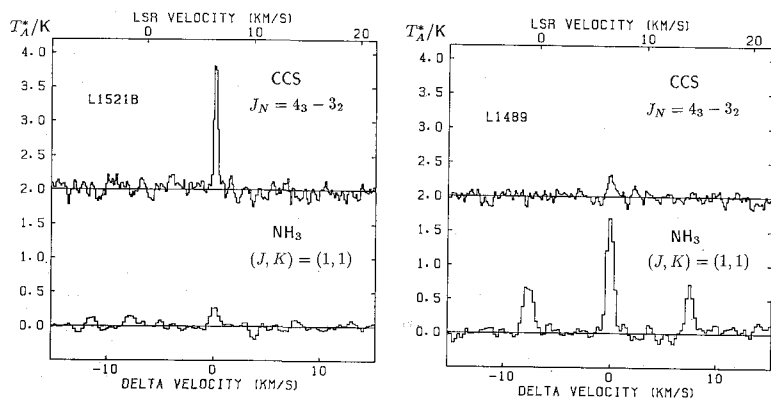


図3 暗黒星雲 L1521B と L1489 での CCS (45379 MHz) と NH<sub>3</sub> (23694 MHz) のスペクトル。二つの天体で、化学組成が大きく違っていることがわかる。

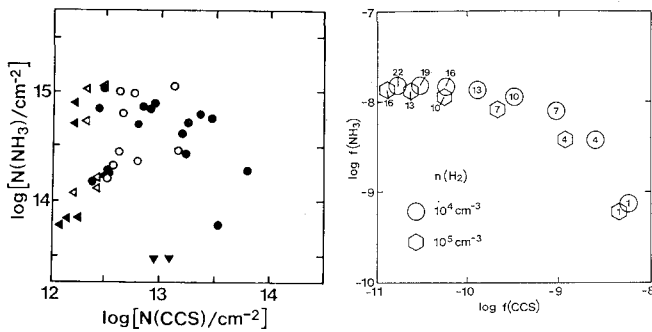


図 4 (左) 多くの暗黒星雲で観測した CCS と NH<sub>3</sub> の柱密度のプロット。化学組成は様々でないことが一目でわかる。白抜き記号は星形成領域。三角は上限値を示す。(右) 化学モデル計算による化学組成の進化のシミュレーション。縦軸、横軸はそれぞれ CCS と NH<sub>3</sub> の水素分子に対する存在比を表わす。丸印は水素分子密度が 10<sup>4</sup> cm<sup>-3</sup> の場合、六角形は 10<sup>5</sup> cm<sup>-3</sup> の場合で、中の数字は反応開始からの時間を 10<sup>5</sup> 年単位で表す。温度は 10 K。CCS が多くて NH<sub>3</sub> が少ない状態 (図の右下) から、CCS が少なく NH<sub>3</sub> が多い方 (図の左上) へ進化して行く。左のプロットと比べると、星形成領域が化学進化の後期にあっていることがわかる。

暗黒星雲の寿命はおおよそ 10<sup>6</sup> 年程度とされています。それに対して、化学平衡に達する時間は 10 倍以上長いことが知られています。このことから判断すると、暗黒星雲の化学組成は必ずしも平衡状態ではなく、刻々と変化していると考えられます。もし、化学進化の道筋に、すべての暗黒星雲に共通する普遍性があるとすれば、ひとつひとつの暗黒星雲の化学組成の違いは暗黒星雲の化学進化を見ている可能性が非常に高いと言えます。これまでも、TMC1 のような炭素鎖分子の多い暗黒星雲は、10<sup>5</sup> 年程度の進化段階とするとその化学組成がよく説明できることが指摘されてきました。しかし、ひとつの雲をいくら詳しく調べても、実際に化学進化が起きていることを示すことはできません。しかし、49 個の雲をみれば、そのなかには若いものもあれば年老いたものもあるはずで、鈴木さんのサーベイによって、観測的に化学進化を調べることができるようになったのです。

このことに気が付いてからは、急速に物事が見えはじめてきました。希薄なガスからの収縮によって暗黒星雲ができると考えると、はじめ炭素は星間紫外線によってイオン化され、炭素イオンとして存在しています。それが時間がたつにつれ中性化し、そして最後には一酸化炭素となって安定化します。その時間スケールはおおよそ 10<sup>6</sup> 年のオーダーです。CCS のような炭素鎖分子は雲の年齢が比較的若く、炭素原子がまだ残っているときに効率よく生成しますが、年齢とともに減少します。一方、NH<sub>3</sub> は生成の速度が遅く、年齢とともに存在量が増加します。星形成領域で CCS が少なく NH<sub>3</sub> が多いのは、星形成が化学進化の後期に起きているためと合理的に理解できます。私たちは、化学モデル計算を行って、観測される化学組成の違いが化学進化として理解できることを示しました (図 4)<sup>9)</sup>。

もちろん、このことはもっと多くの分子の観測によって確認し、強めていく必要があります。しかし、化学進

化が化学組成の違いの主要な部分を決定している可能性は非常に高いと考えています。もしそうであれば、化学分析という眼によって、雲の進化をみることもできます。この方法は、将来、暗黒星雲の物理進化を調べる上で新しい視点を提供することになると考えています。

私は、化学進化についての論文をまとめながら、鈴木さんが何とってくれるだろうかとしばしば思いました。しかし、そのたびごとに、もう永遠に議論することができないことを思い知らされるだけでした。

### 6. おわりに

思えば本当に無我夢中の 4 年間でした。でも、その模索の中で、天文学と化学の間で新しい領域をつくっていきそうな気がしてきました。一見中途半端にみえるかもしれませんが、化学という全く別の視点に立つと、天文学上のテーマに新しい見方が生まれてきます。そして、天文学としての面白さが、分子に一風違った意味を与えてくれます。この学際的分野を本格的な一分野として確立できるよう、私は、あくまで化学者の心をもって、微力ながら天文学に取り組んでいきたいと思っています。最後になりましたが、何も知らない私をこの分野に導いて下さった齋藤さん、鈴木さん、海部さん、そして、研究の中で、助言と励ましをいただいた大石さん、川口さんをはじめとする多くの方々に、この場をお借りして深く感謝いたします。

### 参 考 文 献

- 1) Yamamoto et al., *Astrophys. J. (Letters)*, **322**, L55 (1987).
- 2) Yamamoto et al., *Astrophys. J. (Letters)*, **323**, L149 (1987).
- 3) Yamamoto et al., *Astrophys. J.* **348**, 363 (1990).
- 4) Mikami et al., *Astron. Astrophys.* **217**, L5 (1989).
- 5) Suzuki et al., *Astrophys. J.* submitted.