

分子雲に直線炭素鎖アルコールはあるのか？

荒木 光 典

〈東京理科大学理学部第一部 〒162-8601 東京都新宿区神楽坂 1-3〉

e-mail: araki@rs.kagu.tus.ac.jp

メタノール，エタノールなど，アルコールは星間分子として豊富に存在することが知られている。直線炭素鎖分子も，多くの種類が星間空間に特有の分子として発見されている。この両方の性質をもつ分子である直線炭素鎖アルコール HC_4OH を実験室のマイクロ波分光器を用いて見つけ出すことができた。そして，星間空間での存在を予想し，野辺山宇宙電波観測所のミリ波望遠鏡を用いて，暗黒星雲TMC-1と星形成領域L1527の両方で探査を行った。しかし，意外にもこの直線炭素鎖アルコールは，これら二つの分子雲には存在しなかった。

1. はじめに

自然界には「ありそうでないもの」がある。動物ではツチノコがその例ではないだろうか。本稿はそのような「ありそうでない星間分子」の話である。アセチレン HCCH は最も基本的な直線炭素鎖分子である。さらに，アルコールも最も基本的な分子の一つである。では，この両者の構造をもつ $\text{H-C}\equiv\text{C-OH}$ (HCCOH)はどうだろうか？高校レベルの化学を勉強すれば容易に想像がつくこの分子について，意外にも，化学の世界でこれまでに実験的にとらえられた報告はなかった。もちろん，さらに炭素鎖の長いジアセチレン $\text{H-C}\equiv\text{C-C}\equiv\text{C-H}$ に OH が付加した分子 $\text{H-C}\equiv\text{C-C}\equiv\text{C-OH}$ (HC_4OH , 図1)もこれまでの報告はなかった。すなわち「ありそうでない分子」であった。

HCCOH や HC_4OH のように，直線炭素鎖分子に OH が付加したアルコールを，ここでは直線炭素鎖アルコールと呼ぶことにする。これを今回，気相の回転分光法の一つであるマイクロ波分光法を用いて，実験室で見つけ出すことができた。となると，星間空間でも「ありそうな星間分子」と

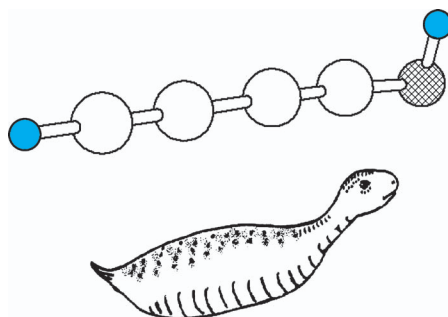


図1 直線炭素鎖アルコール HC_4OH . 量子化学計算から得られた分子構造. 絵は筆者によるツチノコの想像図.

なってくる。

2. マイクロ波分光での実験

はじめは2007年のことである。上智大学の熱分解反応炉を備えたマイクロ波分光器を前に，「何か星間空間にありそうな分子が研究できないか」と思案していた。とりあえず，種々の分光法でこれまで測定されていない分子として直線炭素鎖アルコール HCCOH をターゲットに考えた。そして，熱分解で壊れることによってこの分子を生成しそうな2-ブチノール $\text{H}_3\text{C-C}\equiv\text{C-CH}_2\text{-OH}$ を原料にして，生成を

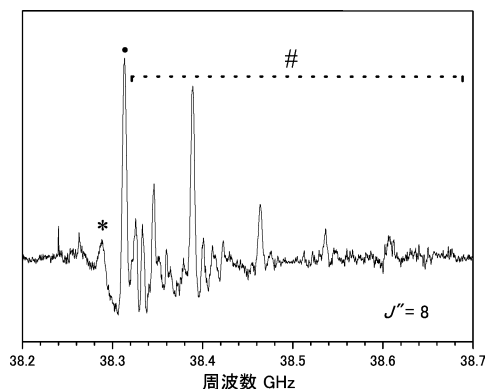


図2 上智大学のマイクロ波分光器によるHC₄OHの回転スペクトル. 図3と図5では“8”(図3の説明参照)と示されているライン付近の実験室マイクロ波分光のスペクトルである. ●で示したピークが $J_{Ka,Kc}=9_{1,8}-8_{1,7}$, *で示したピークが $J_{Ka,Kc}=9_{1,9}-8_{1,8}$ の回転遷移である. #で示した部分は振動励起したHC₄OHによる構造である. 宇宙空間での観測対象になる $J_{Ka,Kc}=9_{0,9}-8_{0,8}$ のラインの位置は*より少し低周波数側38.245 GHzであるが, 分光器の性質上, このスペクトルには現れていない.

狙ってみた. 熱分解反応炉にこの原料を入れて加熱し, 適当な温度である800度くらいになったところで, マイクロ波分光器の周波数を38 GHz帯で試験的に掃引してみた. すると, 最初の掃引で早速何らかの分子のスペクトルが出現した(図2). 条件を最適化した後で, マイクロ波分光器を19-39 GHzのより広い範囲で掃引してみた. すると4.257 GHzの間隔で図3の上を示した一群のピーク構造が出現していることがわかった. かなり大雑把なイメージであるが, 直線あるいはそれに近い分子の回転スペクトルにおいて, スペクトルの間隔はその分子の回転定数(直線炭素鎖: B , それに近い分子: $(B+C)/2$)の2倍である. この回転定数から分子のおおよその重さが予測できる. すると, 得られたスペクトルがHCCOHのものでないことは容易に理解できた. HCCOHならもっと広いスペクトルの間隔になるはずであ

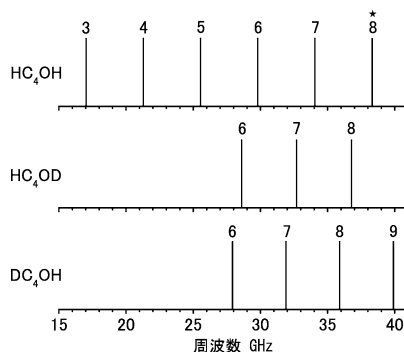


図3 測定されたHC₄OHの回転スペクトルの全体構造. 図2に示した回転スペクトルの構造が, HC₄OHでは6カ所, 等間隔で観測された. 図の中の値は低いほうの回転状態の J'' の値である. $J_{Ka,Kc}=9_{0,9}-8_{0,8}$ なら“8”で表してある. 図2に示したスペクトルの場所は, ★印の場所である. HC₄ODでは3カ所, DC₄OHでは4カ所やはり等間隔の構造が観測された. HC₄ODとDC₄OHの回転スペクトル構造はあらかじめ図1の構造を用いて予想し, その予想位置に現れた.

るし, HCCOHよりも重い分子であるはずである*¹. かつ2-ブチノールを原料に生成する分子である. 何種類かの分子を考えてみた結果, HC₄OH(図1)がちょうどよい大きさの回転定数を持ちそうであることがわかった. そこで, 量子化学計算という手法を使って精密な回転定数の予測を行った結果, 実験で得られた回転定数と一致した. さらに, 原料である2-ブチノールと重水を熱分解反応炉の中で混ぜて, HC₄OHの重水素置換体であるHC₄ODやDC₄OHを生成した. 量子化学計算からすでに分子構造がわかっているため, 重水素置換体(分子構造がHC₄OHと同じで水素原子の重さだけが異なる)がどこにスペクトルを出すのか, 理論的に予測できた. そして, マイクロ波分光器の掃引により予測どおりのスペクトルを得ることができた(図3中と下). このようにして, 得られたスペクトルをHC₄OHに帰属できることが確認された.

*¹ HC₄OHが確認された後, ほかの原料を用いて改めてHCCOHを探してみたがやはり見つからなかった.

3. 野辺山での観測

ここで、研究に一区切りつけて、ここまでの結果を学術雑誌のアストロフィジカル・ジャーナル・レター誌に出版した¹⁾。そして、その結果をもとに、国立天文台・野辺山宇宙電波観測所の45 mミリ波望遠鏡(図4)を用いて、星間空間での探査を試みることにした。まず、「どの天体を探査すべきか」という問題であるが、炭素鎖分子が豊富にある天体にすべきことは明らかである。すなわち、オリオン座分子雲やいて座のSgrB2などの飽和炭化水素の生成が有利になった分子雲は避けるべきである。もう一つの条件として、メタノールが観測されていて、酸素を含む分子が豊富に存在することである。この二つの条件を満たす分子雲は、第一に、おうし座分子雲領域の星形成

領域L1527である。L1527では、これまでたくさん酸素を含む分子が発見されてきた²⁾(表1)。しかも、炭素鎖分子も豊富に検出されている。さらに、暗黒星雲TMC-1では、L1527に比べて酸素を含む分子は少なめであるが、炭素鎖分子がこれまで数多く検出されている³⁾。そして、メタノールのラインの検出報告もあり³⁾、酸素を含む分子としてはC₃O^{4),5)}やH₂CCO^{6),7)}も報告されている。そこで、これら二つの分子雲を調査対象に選んだ。

次に、「どの周波数帯で観測するか」である。典型的な温度はTMC-1では6 K、L1527では10 Kである。これらの温度において、この分子のラインの相対強度を計算してみた(図5)。すると野辺山の受信機の範囲とうまく重なる強いラインとして、TMC-1では $J_{K_a, K_c} = 6_{0,6} - 5_{0,5}, 7_{0,7} - 6_{0,6}$ を、L1527では $J_{K_a, K_c} = 8_{0,8} - 7_{0,7}, 9_{0,9} - 8_{0,8}, 10_{0,10} - 9_{0,9}$ を観測の対象として選び出すことができた(図5に●で示す)。ちなみに、本稿ではJやKなどが何度か出てくる。これらは分子の回転エネルギーを規定する回転量子数と呼ばれるものである。正確な説明は教科書に譲るが、Jにより図3と図5に見られるような回転構造の全体像が表現され、Kによりさらに細かい部分が表現される。38 GHz帯を例にとると、ここでは $J_{K_a, K_c} = 9_{0,9} - 8_{0,8}$ に関するラインを観測対象としたが、8, 0, 8はそれぞれJ, K_a, K_cのとる値である。Jは分子の回転全部の激しさを表現し、K_aはこのJのうち分子のH-C≡C-C≡C軸におおよそ沿った回転軸回り



図4 野辺山宇宙電波観測所の45 mミリ波望遠鏡。長野県の野辺山高原、標高1,350 mにある。

表1 L1527で発見された星間分子。

原子数	2	3	4	5	6	7	8, 9, 11
	CO	HNC	<i>l</i> -C ₃ H	<i>l</i> -C ₃ H ₂	C ₄ H ₂	HC ₅ N	C ₆ H ₂
	SO	HCO ⁺	HCO ₂ ⁺	<i>c</i> -C ₃ H ₂	C ₅ H	CH ₃ CCH	HC ₇ N
	CS	HCN	HCNO	HC ₃ N	CH ₃ OH	C ₆ H	HC ₉ N
	CN	CCS	H ₂ CO	C ₄ H		C ₆ H-	
		HCS ⁺ *	HNCO	C ₄ H-			
		NNH ⁺					
		CCH					

* 今回の観測で新しく検出された分子, 図7参照.

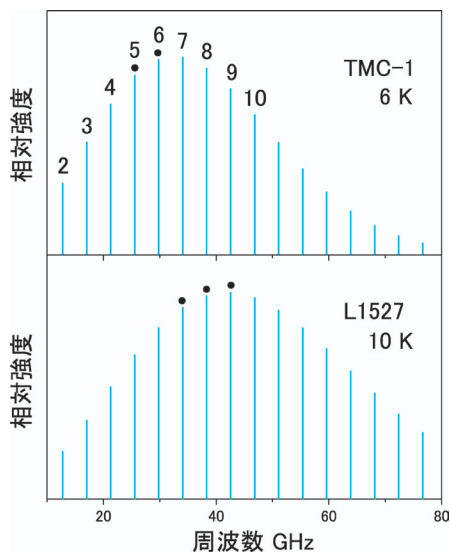


図5 分子雲の温度と相対強度の関係。相対的に強度の強い●で示したラインの探査を行った。右に行くに従い回転量子数は一つずつ大きくなる。各ラインの番号の付け方は図4と同じであるが、11以上は省略した。

の回転の激しさを表現する。電波で観測している分子のラインは、激しい回転をしている分子がそれよりも穏やかな回転に移行する際に放出する電波である。

2009年4月に、最初の観測をこれら二つの分子雲で行った。最初に望遠鏡を向けたTMC-1ではラインの兆候は見えなかったため、次に望遠鏡をL1527に向けた。ここでも明らかなラインは出てこなかったが、積算を続ければラインに成長しそうな兆候が見られた（このときはそう考えた）。しかしここで、今回の観測のよりどころとしているマイクロ波分光器による静止周波数^{*2}の精度に問題があった。この分光器の性質上、測定精度に最大で0.2 MHz程度の誤差が伴っていた。これは電波望遠鏡の精度に比べるとかなり大きい。観測したラインが強ければ、静止周波数の誤差が

多少大きくても検出の確定には支障ないが、今回はラインの兆候に過ぎず、より正確な静止周波数が必要になった。

4. 再びマイクロ波分光での実験

そこで、2009年の夏により精度の高い（フーリエ変換型と呼ばれる）マイクロ波分光器をもつ静岡大学に行き、HC₄OHの測定を試みた⁸⁾。この分光器では、数kHzの精度で回転遷移の静止周波数を決定できる。しかし、この年、まだHC₄OHをこの分光器で測定することはできなかった。

5. 再び野辺山での観測

静岡大学のマイクロ波分光器での精密な静止周波数が得られないなか、2010年3月、さらに天文観測のS/Nを向上してラインを浮かび上がらせるために観測を行った。このときは、-20℃まで気温が下がる日があり、観測条件にはめぐまれた。しかし、積算の結果、めぼしいラインがないことがわかってきた。これは残念なことであるが、S/Nが上がり、結果がはっきりしてきたことは不幸中の幸いである。

そこで、柱密度の上限値を計算してみることにした。ここで問題になるのが、HC₄OHの分子雲コアサイズである。つまり、どのくらいの視直径で分布しているかという問題である。もし、コアサイズが電波望遠鏡のビームサイズより小さければ、電波望遠鏡はHC₄OHが分布していない領域も観測している。すると、得られるライン強度も、ラインがある領域とない領域の平均値になってしまうため、その強度は本来の柱密度を反映したものより弱くなってしまふ。そこで、その補正を行うためにコアサイズを推定する必要がある。もし、コアサイズがビームサイズより大きければ

^{*2} 分子雲で観測される分子の周波数は、分子雲の運動によるドップラーシフトの影響を受けている。これに対し、実験室の分光器で測った分子の周波数は、分子の運動によるドップラーシフトの影響を受けていないため、静止周波数と呼ばれる。

何の問題もないが、そうとは限らない。そこで、今回の野辺山での観測と坂井らによるアメリカのグリーンバンク 100 m 望遠鏡 (GBT) での観測^{2b)}の両方で、L1527においてHC₅Nが観測されていることに着目した。同じ分子を観測したにもかかわらず、これらの間には強度の違いが見られた。これは、野辺山のビームサイズがコアサイズよりも大きく、ライン強度が弱くなっているためである。もし、野辺山のビームサイズよりもコアサイズが大きく、ライン強度が弱くないのであれば、両者はほとんど同じ強度をもつはずである。そこで、その強度比からコアサイズを見積もったところ33秒角(1秒角=1/3,600度)であった(図6)。HC₄OHの柱密度を計算するときは、このビームサイズとコアサイズの違いによるライン強度の補正を行った。

ここまでで得られているHC₄OHの未検出のスペクトルからHC₄OHの柱密度の上限値を計算すると、L1527では $4.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 、TMC-1では $5.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ となった。この値は、分子の温度を12.3 Kとし、永久双極子モーメントを1.65 Dとして計算された。HC₄OHはHC₄にOHが結合した分子と考え、CNが結合した分子はHC₅Nである。これまでの観測により、HC₅NはL1527では $(6.8 \pm 1.4) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ であること

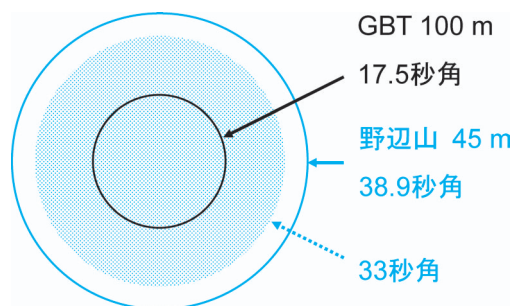


図6 各望遠鏡のビームサイズとそこから推定されたL1527のHC₅Nにおける分子雲コアサイズ。GBT 100 mでのスペクトルの積分強度は $0.585 \text{ K km s}^{-1} \text{ 2b)}$ 、野辺山45 mは $0.422 \text{ K km s}^{-1}$ である。これらをもとに分子雲コアサイズ33秒角が推定された。

がわかっている^{2b), 2c)}。この時点の筆者らの観測では、HC₅NよりHC₄OHが少ないことすら示すことができず、今後化学反応などを考えるためのデータとしては貧弱であった。分子雲での検出を確定するためには最低3本のラインを観測する必要があるため、ここまでの観測は多くのラインに観測時間を分散してきた。しかし、上限値を決定するためには、1本のラインを観測するだけでよい。そこで、ライン1本に観測時間を集中する方式に切り替えた。

6. さらにマイクロ波分光での実験

一方、2010年の夏も静岡大学のマイクロ波分光器での実験は引き続き行われた。今度は、実験室で合成した試料を用いることでHC₄OHを生成し、観測することができた⁸⁾。ところが、これまで観測に用いていたラインの静止周波数は精密な値より少しずれていたのである。これは、上智大学のマイクロ波分光器はその性質上 $K_a=0$ のラインを測定しにくく、見逃していたためである。星間空間では温度が低いため、 $K_a=0$ のラインの観測が重要である。ただ、周波数が大きく違うわけではない。今まで野辺山で観測していたスペクトルの中で、今まで注目していた周波数から、少しずれた周波数を見てみた。「もしかしたらラインがあるのではないか」と期待したが、やはりそこには何もなかった。

7. さらに野辺山での観測

もはや両分子雲にHC₄OHがないことははっきりしたが、それが星間空間で存在しないとすると、その存在量の上限値はより正確に決めたいところである。C₄HやHC₅Nと比べて十分に少ないことは確認したい。そこで2011年1月に3度目の共同利用をさせていただき、今度は1本だけに絞ったラインを、二晩かけて徹底的に積算した(図7b)。その結果、スペクトルのノイズレベルをアンテナ温度(電波の強さの指標)で9 mKま

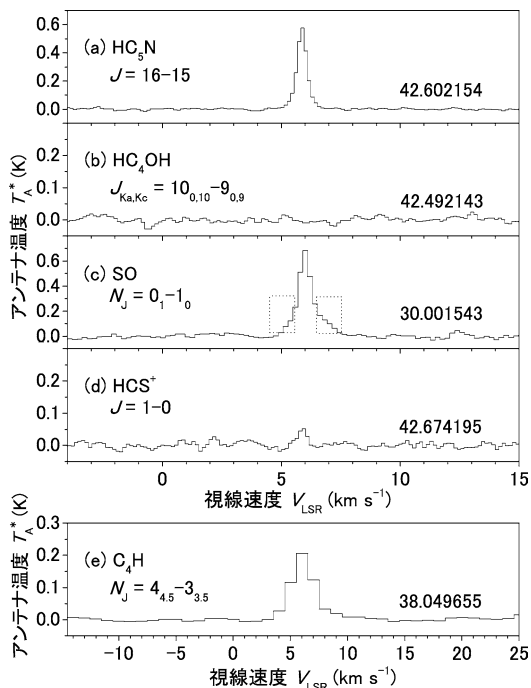


図7 L1527における、 HC_4OH の検出が期待される周波数付近のスペクトルと観測された分子のスペクトル. 右側に、その分子の静止周波数をGHz単位で示した. この図では横軸を周波数から視線速度(分子の運動速度)に焼き直している. この天体に属するガスならすべて5.8 km/s付近にピークを示す. 縦軸のアンテナ温度は電波の強さを示している. SOのラインにおいて、ラインの裾野が他のラインよりも広がっている(点線で囲まれた部分). この部分が双極分子流によるものと考えられる.

で下げることができ、存在量の上限值を $2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ と決めることができた. HC_4OH の存在量は C_4H や HC_5N と比べてかなり小さく、 C_4H の2%以下であり、 HC_5N の30%以下であった. 実験室で安定な、「ありそうな分子」が分子雲にはなかったのである⁹⁾.

8. 副産物

かくして、ありそうな分子 HC_4OH はなかった. しかし、その探査の際には HC_4OH のラインが見える周波数帯だけでなく、その周辺の周波数

帯もスペクトルを取っていた. そのスペクトルの中に、 HCS^+ のラインがあり、この分子のL1527での初めての検出となった(図7d). また、 C_4H や HC_5N は新たなラインを検出することができた. C_4H の新たなラインが検出されたことから、今までよりもよい柱密度を再導出できた(図7e). また、SOは、図7cに見られるように、原始星を中心に両側に吹き出るガス(双極分子流)の成分と見られる速度成分が観測された. 一連の観測では、目的の分子は見つからなかったが、これらの副産物を得ることができた.

9. 最後に

話を直線炭素鎖アルコールに戻し、なぜないのであろう. この分子自体が新しい分子であるため、当然のことながらこれまで、星間空間での生成の反応は何も示唆されていない. ただ、今回観測されなかった理由としては、次のように考えられる. 一つは、直線炭素鎖構造をもつために、気相反応で生成しなければならない. すると発熱反応で生成しなければならない. この発熱反応による有効な反応経路が存在しないのかもしれない. また、経路が存在してもその原料となる前駆体の量が足りなかったのかもしれない. もう一つは、アルコールは比較的励起温度の高い星形成の進んだ分子雲に存在するのにに対し、直線炭素鎖分子は温度の低い分子雲に多い. 両方の構造をもつ直線炭素鎖アルコールは、どちらにも存在しにくいと考えることもできる.

しかし、今回の実験室マイクロ波分光を通して、 HC_4OH の静止周波数は確定できた. そこで、今後この分子はすべての分子雲での分子探査において、常に監視されることになる. ツチノコより先に発見されることを期待したい.

謝 辞

本研究は多くの方々との共同研究です^{1),9)}。上智大学の久世信彦さんと國松亜利沙さんは、マイクロ波分光実験と試料の合成を行ってくれています。国立天文台の高野秀路さんは、筆者を電波観測の面で支えてくれています。静岡大学の岡林利明さんは、フーリエ変換型マイクロ波分光器を運用されています。実際に $K_a=0$ のラインを分光器で見つけてくれたのは岡林研究室の中根 綾さんです。最後に、電波観測やその解析などを共に行ってきてくれた東京理科大学のメンバーは、東京理科大学の築山光一さん、越川直洋さん、山辺裕倫さん、茅根彩花さん、工藤沙紀さん、梅木博也さんです。この場を借りて御礼申し上げます。

参考文献

- 1) Araki M., Kuze N., 2008, ApJ 680, L93
- 2) 例えば, (a) Sakai N., et al., 2007, ApJ 667, L65; (b) Sakai N., et al., 2009, ApJ 702, 1025; (c) Sakai N., et al., 2008, ApJ 675, L89
- 3) Kaifu N., et al., 2004, PASJ 56, 69
- 4) Matthews H. E., et al., 1984, Nature 310, 125
- 5) Brown R. D., et al., 1985, ApJ 297, 302
- 6) Matthews H. E., Sears T. J., 1986, ApJ 300, 766

7) Irvine W. M., et al., 1989, ApJ 342, 871

8) Kuze N., et al., to be submitted

9) Araki M., et al., 2012, ApJ 744, 163

Is a Carbon-Chain Alcohol in Molecular Clouds?

Mitsunori ARAKI

Faculty of Science Division I, Tokyo University of Science, 1-3 Kagurazaka, Shinjuku-ku, Tokyo 162-8601, Japan

Abstract: Alcohol is one of the most abundant molecules in molecular clouds, and many species of linear carbon chains have been observed in dark clouds. The carbon chain alcohol HC_4OH having a structure of the both alcohol and linear carbon chain was detected by laboratory microwave spectroscopy for the first time. Thus HC_4OH was searched in the dark cloud TMC-1 and the star forming region L1527 using a Nobeyama 45 m radio telescope. Contrary to our expectation, HC_4OH was not detected in both clouds.