

巻頭言

高感度観測・実験・理論計算の融合で拓く
次世代のアストロケミストリー

坂井 南 美

〈理化学研究所 開拓研究本部 坂井星・惑星形成研究室 〒351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1〉

e-mail: nami.sakai@riken.jp

1. はじめに

近年、数千を超える系外惑星が発見され、系外惑星系が太陽系とは大きく異なる物理的構造を持つことがわかってきた。一方、ALMA望遠鏡による観測では、惑星系形成領域で様々な有機分子が捉えられている。天体ごとにその化学組成には大きな違いがあり、原始太陽系の化学環境が必ずしも普遍的なものではなかった可能性も示唆されている。惑星系形成に伴う化学進化、そしてその多様性の全貌解明は、生命を育む太陽系環境の起源を辿るうえで避けては通れない課題である。

太陽系自体の過去を探る研究も、この数年で大きく進んだ。ヨーロッパ宇宙機関のRosettaミッションでは彗星核表面で様々な有機分子が検出され、2020年末には、「はやぶさ2」が太陽系始原天体と考えられる物質（C型小惑星リュウグウ試料）を地球に持ち帰り、有機物の分析が進んでいる。このような状況にあって、太陽系の物質的・化学的起源と、それに直結する惑星系形成時の化学状態の研究に大きな注目が集まっている。

“銀河・恒星・惑星系など様々な構造の形成過程で、物質がどのようにに関わり合いながら進化し、惑星系へともたらされるのか,” “海や大気をもち生命を育む地球のような惑星はどれほど普遍的に誕生しうるのか” といった「宇宙の物質史」は、構造形成史とともに理解されるべき重要な課題である。ALMAや「はやぶさ2」で得られる情

報を統合できる今こそ、その成果を基盤としてこの課題を飛躍的に進める絶好のチャンスである。

2. 見えてきた化学的多様性

惑星系形成領域で最初に発見された化学的多様性は、 CH_3OH や CH_3OCH_3 などの飽和有機分子に富むもの、あるいはCCHや $\text{c-C}_3\text{H}_2$ など不飽和有機分子に富むもの、という有機分子の飽和・不飽和を多様性の「軸」としたものであった。その起源としては、星形成の母体となる分子雲における“星の誕生のタイミング”や紫外線の強さなどの外的環境要因が考えられている。一方、研究が進むにつれ、ほかにも様々な多様性の「軸」が存在している可能性も見えつつある。このような状況にあって、観測によってそれらの全貌を掴み、化学反応ネットワーク計算の結果も併せてその起源を総合的に明らかにすることが求められている。形成直後の原始惑星系円盤の化学組成は、その後の進化の初期条件ともなるからである。

化学的多様性とその惑星系への進化を、現象論を超えて本格的に理解するためには、従来の星間化学の枠組みを再構築していく必要がある。それは、これまでの星間化学が、主に極低温（ ~ 10 K）・極低密度（水素分子個数密度 10^4 – 10^6 cm^{-3} ; 圧力 10^{-12} – 10^{-10} Pa）の化学過程を基礎としているためである。一方、惑星系形成領域は、構造形成が進むダイナミックな場であり、極低温・極低密度と中間温度（数 10 – 300 K）・中間密度（ 10^7 –

10^{12} cm^{-3}) 環境を行き来する。これが、豊かな化学組成やその多様性を育む理由にもなっている。それに対応して、化学反応の素過程に基づく強固な学理の構築が求められているのである。

3. 分子形成の素過程に立ち戻る

星間空間において、分子は気相反応および固体微粒子（星間塵）の表面での反応で生成される。星形成の母体となる分子雲は、10 K程度の極低温環境にある。そこでは、多くの分子は星間塵表面に吸着し、昇華しやすい比較的単純な分子のみが気相に残る。気相では発熱反応のみが進行し、塵表面では水素原子による水素化が主に起こる。極低温下では塵表面からの分子の脱離は起こりにくいため、塵表面と気相との分子のやりとりは極めて限定される。その結果、塵表面と気相における化学過程をそれぞれ独立に考えることができた。

しかし、原始星が誕生し、原始惑星系円盤が形成される領域では、温度や密度が上昇し、塵表面での（水素より）重い原子・分子の表面拡散が可能となる。その結果、有機分子を含む様々な分子種が形成され、気相に放出される。また、気相においても、吸熱反応や反応障壁を伴う反応が進行する。こうした塵表面での活発な化学反応、そして気相との密接な相互作用は、極低温・極低密度の化学と常温・常圧の化学から単純に内挿できるものではない。本格的に取り扱うには、分子レベルでの物理・化学過程に立ち戻った理解が必要で、最先端の分子科学実験や量子化学計算研究などとの協働が不可欠となる。それらの結果を、化学反応ネットワーク計算に取り入れ、天体の構造進化シミュレーションと合わせて観測と比較していくことではじめて、惑星系形成への化学進化の道筋を明らかにすることができるだろう。この取り組みは、現在、科学研究費 学術変革領域研究 A「次世代アストロケミストリー」（領域代表：坂井、2020年度-2024年度）として推進されている。

4. 化学することの意味と広がり

宇宙における化学の研究は、様々な構造の物理的な形成過程の研究にも少なからぬインパクトを与えてきた。たとえば、分子雲コアの進化段階の診断や、衝撃波領域の検出に「化学診断」が果たした役割は大きい。最近では原始惑星系円盤形成のメカニズム解明においても「化学診断」が大きな役割を果たしている。ALMA望遠鏡では、惑星系形成現場だけでなく、銀河中心核領域や爆発的星形成領域、晩期型星、さらには系外銀河の星形成領域など、様々な領域において多種多様な分子が観測できる。温度や密度などの物理状態だけでない豊富な情報を含んだ分子の観測データを活用できれば、天体物理学研究においても無限の可能性が広がるといえる。

一方、宇宙を「化学の実験室」として捉えて研究を進めることは、様々な学問分野の発展にも繋がった。例えば、星間分子として見つかった炭素鎖分子を地上で合成する試みの過程でフラレンが発見され、ナノサイエンスの創生に一役買ったのは有名な話である。今、問題となっている動的かつ非平衡の特徴を持つ中間温度・中間密度の化学は、化学分野、特に分子科学としても広大な未踏の世界である。また、量子化学計算や大規模シミュレーション計算、AI・深層学習など、計算科学の分野にも新鮮なテーマを提供するかもしれない。地球惑星科学分野では、系外惑星やアストロバイオロジーの研究に直接的に関係するだろう。

このように、物質科学を軸とする宇宙史の研究は、私たちの起源という意味でのそれ自身の面白さ、天体の物理状態や進化を探る新たな手段としての面白さ、複雑系化学としての面白さ、そして他分野への発展の可能性を秘めた非常に魅力的な分野である。そういった多角的な観点から、このアストロケミストリー特集をお楽しみいただければと思う。執筆者の多くは、各分野の一線で活躍している若手である。その勢いと新しい分野を拓く意気込みを感じ取っていただければ嬉しい。