

## 特集「水素・酸素同位体分別の起源」

# 星間分子雲と原始惑星系円盤における 重水素濃縮

相川 祐理<sup>1</sup>

## 1. 分子雲での化学反応

本稿では星・惑星系形成領域での重水素/水素比について概観する。宇宙空間は希薄なガスで満たされている。密度や温度は場所によって異なる。星は比較的高い密度の領域（水素個数密度  $n(\text{H}_2) = 10^3 - 10^4 \text{cm}^{-3}$ ）低温（10～数10K）な分子雲と呼ばれる領域でガスが重力収縮することによって生まれる。分子雲はその名のとおり分子ガスでできている。分子ガスの化学組成は電波や赤外の分光観測で調べられている。宇宙の元素存在度を反映して、最も多いのは水素分子である。重元素からはさまざまな分子ができています（表1）。一酸化炭素、水、アンモニアな

ど地上でもなじみのある分子のほか、炭素鎖分子（ $\text{C}_4\text{H}$  など炭素が直線状に鎖状に連なった分子）など奇異な分子や  $\text{HCO}^+$ 、 $\text{N}_2\text{H}^+$  といったイオン分子も存在する。これらは地上ではすぐにはほかの分子と反応してしまうが、分子雲程度の密度ではほかのガス粒子との衝突は数日に一度しか起きないため分子雲全体では観測できるほどの量が存在できるのである。分子雲の化学組成のもうひとつの特徴は重水

素をもつ分子の存在度が高いことである。重水素と水素の宇宙元素存在度比が  $1.5 \times 10^{-5}$  であるのに対し、ふつうの水素を含む分子とその一部を重水素で置換した分子の存在比は  $10^{-3} - 10^{-1}$  と桁違いに高い（表2）。このような現象を重水素濃縮という。

重水素濃縮がおこる仕組みを理解するために、まずは分子雲での化学反応について概観しよう。分子雲は低温なので活性化エネルギーのある熱化学反応はほとんど起こらない。化学反応を駆動する主なエネルギー源は宇宙線と呼ばれる高エネルギー粒子であると考えられている。宇宙線はガスを電離し、生成されたイオンが引き起こすイオン-分子反応が分子雲での主な

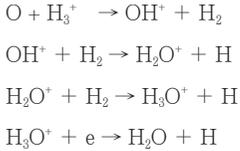
表1：分子雲の組成

おうし座分子雲における主な気相分子 [12]			
分子種	水素分子に対する 相対存在度 $n(i)/n(\text{H}_2)$	分子種	水素分子に対する 相対存在度 $n(i)/n(\text{H}_2)$
CO	8(-5)	OH	3(-7)
$\text{C}_2$	5(-8)	$\text{C}_2\text{H}$	5(-8)
$\text{C}_3\text{H}_2$	3(-8)	CN	3(-8)
NO	3(-8)	HCN	2(-8)
HNC	2(-8)	$\text{H}_2\text{CO}$	2(-8)
$\text{NH}_3$	2(-8)	$\text{C}_4\text{H}$	2(-8)
CH	2(-8)	CS	1(-8)
$\text{C}_2\text{S}$	8(-9)	$\text{HCO}^+$	8(-9)
NGC7538: IRS9 における水の組成 [13]			
分子種	$\text{H}_2\text{O}$ を 100 とした 相対存在度	分子種	$\text{H}_2\text{O}$ を 100 とした 相対存在度
$\text{H}_2\text{O}$	100	CO	16
$\text{CO}_2$	20	$\text{CH}_4$	2
$\text{CH}_3\text{OH}$	5	$\text{H}_2\text{CO}$	2
$\text{NH}_3$	13	HCOOH	3

(脚注：a(-b) は  $a \times 10^b$  を意味する。)

1. 神戸大学理学部地球惑星科学科

反応機構である。最も存在量の多い水素分子は電離されると $H_2^+$ になり、これが $H_2$ と反応すると $H_3^+$ になる。 $H_3^+$ は重元素原子にプロトンを与えてイオン分子をつくり( $X+H_3^+ \rightarrow XH^+$ )、これが複雑な分子を作る一連の反応の入り口となる。例えば水は



という反応で生成される。以上は気相での反応である。

一方、星間ダスト表面でも化学反応が起こると考えられている。星間空間にはサブミクロン以下の小さなダスト(塵)が存在する。水素に対する存在度は質量比で1%、個数密度で $n(\text{dust})/n(H_2) \sim 10^{-12}$ である。低温な分子雲内ではガス粒子がダストに衝突すると0.1-1程度の確率で吸着する。 $H_2O$ や $NH_3$ のように比較的揮発性の低いものはダストが星形成等で温められない限りダスト表面にとどまり氷マントルを形成する。

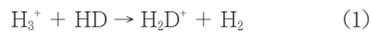
揮発性の高いものはダスト表面を拡散し、昇華する前に他の吸着分子や原子と出会えば化学反応を起こす。天文学的にもっとも重要なのは水素分子の生成である。気相では $H+H \rightarrow H_2$ という反応は生成エネルギーを解放しにくいので反応率が低い。星間ダスト上に吸着した水素原子同士の間ならば生成エネルギーをダスト表面に捨てることのできるため気相よりも効率よく水素分子をつくることのできる。水素原子は質量が小さくダスト表面での拡散速度が大きい。ダスト表面に重元素原子や分子が吸着した場合でも、水素原子が付加する反応が最もよく起きる。例えば、ダスト表面に吸着した酸素原子に水素原子が2つ付加すると水( $H_2O$ )ができる。この反応は上記の気相での水分子生成よりも効率がよい。実際、低温な分子雲では酸素のうち10%程度が $H_2O$ 水になっており、その大部分はこのダスト表面反応で作られると考えられる。分子雲中に多く存在する一酸化炭素分子がダストに吸着されると逐次水素原子が付加していき $H_2CO$ や $CH_3OH$ が生成される。実際、星が生まれてダストが加熱された領域では $CH_3OH$ が多く存在し、これらはダスト上で生成された $CH_3OH$ が昇華したものと考えられる。吸着粒子の拡散速度や昇華速度はダストの温度に強く依存するため、ダスト表面の氷マントルの組成は場所により大きく異なる。例として特に多種の水が観測されている大質量星形成領域の水組成を表1に示した。氷の重水素比は残念ながら観測ではわからない。

表2：さまざまな天体における分子の重水素比

おうし座分子雲[14]	
分子種	重水素比 $n(XD)/n(XH)$
DCO <sup>+</sup>	1.2(-2)–2.7(-2)
HDCO	5.9(-2)
N <sub>2</sub> D <sup>+</sup>	6.4(-3)–8(-2)
CH <sub>3</sub> OD	2.65(-2)
分子雲コア L1544[15][16]	
分子種	重水素比 $n(XD)/n(XH)$
DCO <sup>+</sup>	4(-2)
N <sub>2</sub> D <sup>+</sup>	2(-1)
D <sub>2</sub> CO	4(-2)
低質量星形成領域 IRAS16293–2422 [17][18]	
分子種	重水素比 $n(XD)/n(XH)$
D <sub>2</sub> CO	3(-2)–1.6(-1)
CH <sub>2</sub> DOH	3(-1)
CH <sub>3</sub> OD	2(-2)
CHD <sub>2</sub> OH	6(-2)
CD <sub>3</sub> OH	1(-2)

## 2. 重水素濃縮過程

では本題の重水素濃縮の仕組みを解説しよう。重水素のほとんどはHD分子として存在し、これが



などの交換反応を起こす(一般的には活性化エネルギーがあるのですべてのイオン分子についてこのような交換反応が起こるわけではない)。重水素と水素の質量の違いにより重水素同位体は普通の分子よりもゼロ

点振動エネルギーが低く\*1これらの交換反応は発熱反応となる。10K程度の温度では逆反応(吸熱反応)が起きないので、 $H_3^+$ や $CH_3^+$ は高い重水素比を持つことになる。上記で述べたように $H_3^+$ は分子雲におけるイオン-分子反応で中心的な存在であるから、 $H_2D^+$ を通して多くの分子が高い重水素比をもつようになるのである。また $H_2D^+$ をはじめ重水素を含むイオン分子が電子と再結合すると、解離再結合によって重水素原子ができ重水素原子/水素原子比が高くなる。これによってダスト上の水素付加反応で生成される分子も高い重水素比をもつことになる。

### 3. 最近の観測とモデル

重水素濃縮過程は以前からよく知られていたが、最近再び注目を集めている。ここでは最近の話題を3つ紹介する。

#### 3.1 星なしコアにおける重元素分子の凍結と

##### 重水素濃縮

分子雲の中でも特に密度の高い( $\geq 10^5 \text{cm}^{-3}$ )領域を分子雲コアと呼ぶ。コアは星形成の現場なので盛んに観測されている。内部にまだ星の存在しない高密度コアを星なしコアと呼ぶ。近年サブミリ波でのダスト熱輻射の観測や、背景星の減光観測によって星なしコアの密度分布が詳細に測れるようになった。これと一酸化炭素などの分子輝線強度分布を比較してみると、密度がコア中心で最大となるのに対して、一酸化炭素や $C_2S$ などの分子輝線強度はコア中心よりも周辺部で強いドーナツ状の分布を示した。コア中心は密度が高いのでガス分子のダストへの衝突が頻繁で、さらに低温のため多くの重元素分子がダスト上に凍結していると考えられる。ガス分子のダストへの吸着・凍結は分子雲内の氷の観測や理論的考察により古くから予想されていたが、実際にコアの中心部で気相分子の存在量

が桁で低くなっていることが初めて観測的に確かめられたのである。

さらに星なしコアの中心部では周囲のガスよりも高い重水素比が観測された。表2には例としてL1544というコアにおける重水素比を示した。このコアは中心密度が $n(H_2)=1.5 \times 10^6 \text{cm}^{-3}$ と高いことから星形成直前のコアとして注目され多くの分子輝線で観測されている。一酸化炭素の輝線強度はコア中心よりも周辺部で高く分子の凍結が進んでいることを示している。

一酸化炭素の凍結により交換反応(1)で高められた重水素比がさらに増幅することが、理論モデルから理解できる。 $H_2D^+$ の破壊に最も効くのは以下の2つの反応である。



(1)(3)(4)の反応の釣り合いを考えると $H_2D^+/H_3^+$ 比は

$$\frac{H_2D^+}{H_3^+} = \frac{k_1 n(HD)}{k_3 n(CO) + k_4 n(e)}$$

となり、一酸化炭素ガスの減少に伴って比が高くなるのがわかる。図1に重力収縮する分子雲コアモデルにおける分子組成進化を示す[1]。収縮が進むにつれて、コア中心部で一酸化炭素ガスが減少し、重水素比が上昇していくことが分かる。またガス分子の重水素比を考える上で分子の凍結は諸刃の刃であることが分かる。すなわち分子凍結によって重水素比 $n(XD)/n(XH)$ は高まるが、重水素化された分子の気相存在度自体( $n(XD)$ )も減ってしまうので観測にかかりにくくなるのである。観測では視線方向の情報はすべて積分されてしまうので、モデルと観測の定量的比較を行う場合、観測から推定された重水素比は分子柱密度の比であることに注意する必要がある。もうひとつ注目に値するのは、 $H_2D^+/H_3^+$ 比がコア中心部で1よりも大きくなっていることである。実際L1544では、重水素濃縮過程

\*1: より正確にはHDよりも高分子の重水素同位体はよりゼロ点振動エネルギーが低いため

において最も重要な $\text{H}_2\text{D}^+$ が観測された[2]. 残念ながら $\text{H}_3^+$ は電波で輝線を出さないので観測が難しく、重水素比はわからない. しかし、 $\text{H}_2\text{D}^+$ の存在度は、理論の予想値 ( $10^{-9}$ ) と同程度であり、これがコア中心での主要なイオンのひとつであることが示唆される.

### 3.2 多重重水素化分子

重水素濃縮の観測的研究では、従来は分子内のひとつの水素が重水素に置き換わった分子が主に観測されていた. XD/XHの存在比が仮に $10^{-2}$ であったとすると、2つの水素が置き換わった分子は確率的にはもとの分子に対して $10^{-4}$ しかないはずである. これでは期待される輝線強度は大変弱くなってしまふので、従来は複数重水素を含む分子の観測は盛んではなかった. しかし近年、多重重水素化分子も高い存在度をもつことが分かってきた. 表2では小質量星形成コアIRAS 16293-2422における $\text{H}_2\text{CO}$ 、 $\text{CH}_3\text{OH}$ の重水素比を示した. このコア内ではすでに太陽よりもやや重い程度の小質量星が生まれている. ほかにBarnard 1やNGC1333という星形成コアで $\text{ND}_3/\text{NH}_3 \sim 10^{-3}$ という比が得られている.

これらの観測に触発されて、理論モデルの再考も進んだ. 気相においては $\text{H}_3^+$ から $\text{H}_2\text{D}^+$ への発熱交換反応と同様、 $\text{HD}_2^+$ 、 $\text{D}_3^+$ も発熱交換反応で作られる. 他の分子に重水素を渡す確率が $\text{H}_2\text{D}^+$ では $1/3$ なのに対し、これらはより高い確率をもつ. 特に重水素濃縮が進んで $\text{H}_2\text{D}^+$ と $\text{H}_3^+$ の比が1近くなった場合、 $\text{H}_2\text{D}^+$ までしか含まないモデルではXD/XHの比は原理的に0.5以上には成り得ない. しかし $\text{HD}_2^+$ 、 $\text{D}_3^+$ を含んだモデルではXD/XH比が1以上になることができ、多重重水素分子も作りやすくなる.  $\text{HD}_2^+$ や $\text{D}_3^+$ をはじめとする多重重水素分子を組み入れた化学反応モデルを低温(10K)高密度( $10^6\text{cm}^{-3}$ )の条件で計算してみると、重水素分子の凍結も手伝って重水素濃縮が進み $\text{H}_3^+$ 同位体の存在比は $n(\text{D}_3^+) > n(\text{HD}_2^+) \sim n(\text{H}_2\text{D}^+) > n(\text{H}_3^+)$ となる. また他の分子についても、 $\text{H}_2\text{D}^+$ までしか含まないモデルよりもはるかに高い重水素比が得られた

[3]. 実際IRAS16293E<sup>\*1</sup>というコアの中心では $\text{H}_2\text{D}^+$ が検出され、その存在度はモデルの予想通り $\text{HD}_2^+$ に近い[4]. IRAS 16293-2422, Barnard 1, NGC 1333はL1544と違ってすでに内部に星をもつコアであるが、星ができてからあまり時間が経っていないので、星形成前の低温状態で作られた高い重水素比を保っていると考えられる.

また観測されている多重重水素化分子のうち特に $\text{H}_2\text{CO}$ 、 $\text{CH}_3\text{OH}$ の同位体はダスト表面での生成が期待される分子である. IRAS 16293-2422などでは、星ができる前にダスト表面反応で生成された分子が、生まれた星によるダスト加熱で昇華してきた可能性が高い.  $\text{HD}_2^+$ や $\text{D}_3^+$ を気相モデルに含めれば解離再結合によって重水素原子が生成される確率も高くなるのでダスト表面反応で生成される分子の重水素比も高くなる.

しかし理論モデルと観測結果を定量的に比較してみると、必ずしもよい一致を示すわけではない. 例えば星が生まれる前の高密度コアにおける $\text{D}_2\text{CO}/\text{H}_2\text{CO}$ 比はRobertsらのモデル計算で再現されていた[3].  $\text{H}_2\text{CO}$ は重水素化された $\text{H}_3^+$ との反応によって $\text{H}_2\text{DCO}^+$ になり、解離再結合によって $\text{HDCO}$ が生成される.  $\text{D}_2\text{CO}$ の生成も同様である. しかし最近、ポテンシャルエネルギー面の理論計算により $\text{H}_2\text{CO}$ と $\text{H}_2\text{D}^+$ などの反応では重陽子 ( $\text{D}^+$ ) は炭素の側に付加される ( $\text{H}_2\text{DCO}^+$ ) のではなく酸素の側に付加される ( $\text{H}_2\text{COD}^+$ ) ことが示唆された.  $\text{H}_2\text{COD}^+$ の解離再結合において分子内の結合の組み換えが起こらなければ $\text{HDCO}$ ではなく $\text{H}_2\text{CO}$ が生成されるので、観測値を再現するのは難しい[5]. 一方ダスト表面反応で生成される分子についてはダスト表面反応のみのモデル計算から、気相の重水素原子と水素原子の比が0.1-0.3程度であれば観測されている存在比を再現できると言われている[6]<sup>\*\*2</sup>. しかし、このような高い重水素原子／

※ 1: IRAS16293 - 2422 のとなりにある別のコア. IRAS16293 - 2422 は中心ですでに星が生まれた温かいコアだが、IRAS16293Eは冷たく一酸化炭素の凍結が起きている.  
 ※ 2: 渡部氏の実験で発見された置換または引き抜き付加反応はここでは考慮されていない

水素原子比はコアが重力収縮によってある程度高密度 ( $n(\text{H}_2) \sim 10^5 \text{cm}^{-3}$ ) になった後でしか得られない. よって観測されているような高い重水素比をもつ  $\text{H}_2\text{CO}$  や  $\text{CH}_3\text{OH}$  は重力収縮の最後の時期につくられた氷表面に局在している可能性がある[1].

3.3 原始惑星系円盤での重水素比

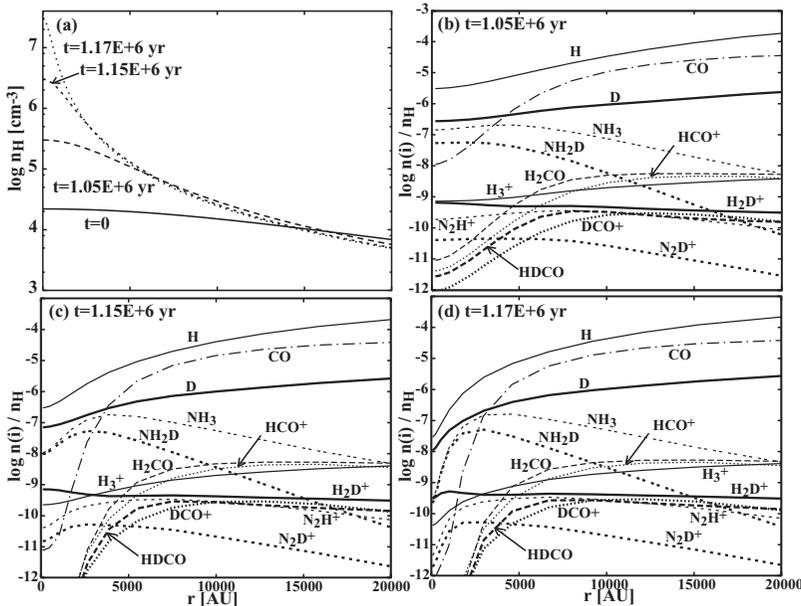
彗星や隕石では高い重水素比が得られている. 重水素濃縮は上記のとおり低温で分子-イオン反応を軸に起こると考えられており, 高い重水素比は太陽系の母胎となった分子雲で生成された物質が彗星の中に残っていることを示すのではないかと議論が長年行われている. 近年原始惑星系円盤の分光観測が盛んに行われるようになり, 当然重水素化分子の輝線も重要な観測対象となっている. 今までに  $\text{DCO}^+$ ,  $\text{HDO}$ ,  $\text{H}_2\text{D}^+$  が検出された[7][8][9].  $\text{DCO}^+/\text{HCO}^+$ 比は0.035である. 現存する電波望遠鏡は空間分解能が低いのでこの値は面積の広い円盤外縁部(半径数10AU以遠)での平均値である. 残念ながら  $\text{HDO}$ ,  $\text{H}_2\text{D}^+$ については  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_3^+$ の観測が困難であることから重水素比は求められ

ていない.  $\text{DCO}^+$ ,  $\text{H}_2\text{D}^+$ はイオン-分子反応によって生成されるイオン分子である. 分子雲から持ち込まれたイオン分子は円盤の典型的な年齢よりも短い時間で再結合してしまうので, これらの観測は分子雲で起こっているようなイオン-分子反応による重水素濃縮反応が円盤でも(すくなくとも円盤外縁部で)起きていることを示唆する.

実際, 円盤内の温度・密度分布を考慮して化学反応ネットワークモデルを計算すると, 観測から推定された  $\text{DCO}^+$ や  $\text{H}_2\text{D}^+$ の存在量がよく再現できる. 例として半径300AUにおける温度, 密度, 気相の分子組成の鉛直分布を図2に示す[10][11]. 半径数10AU以遠における円盤の温度は中心星による加熱で決まっており, 直接星の光を受けられる表層部で数10-100K, 直接光の届かない円盤中心面では10K程度の低温である. 逆に密度は静水圧平衡により中心面に近いほど高い. よって中心面では一酸化炭素をはじめとする重元素分子がダスト表面に凍結している. 実際, 一酸化炭素などの輝線は標準的な円盤モデルの柱密度から予想されるよりもはるかに弱く, 中心面での分子凍結を示

図1 : 重力収縮する分子雲コアにおける分子組成分布

(a) コアの重力収縮に伴う密度分布の時間進化. 初期の中心密度は  $n_{\text{H}} = 2n(\text{H}_2) + n(\text{H}) + n(\text{H}^+) = 2 \times 10^4 \text{cm}^{-3}$ .  
 (b)(c)(d) 中心密度が  $n_{\text{H}} = 3 \times 10^5 \text{cm}^{-3}$ ,  $3 \times 10^6 \text{cm}^{-3}$ ,  $3 \times 10^7 \text{cm}^{-3}$ の時の分子組成分布.

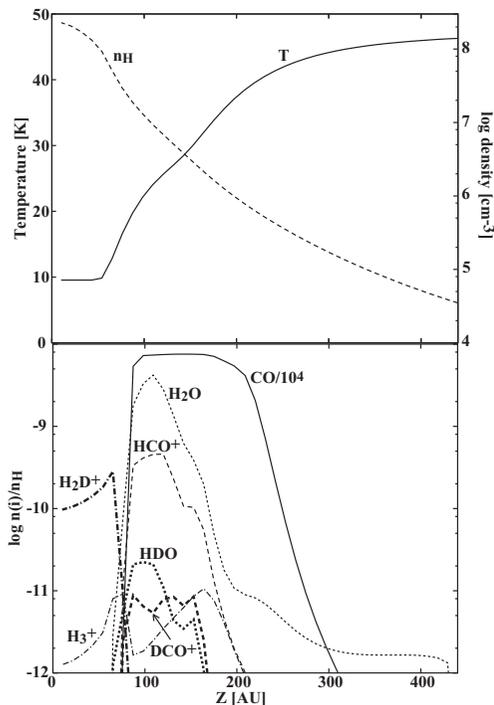


峻する。この円盤中心面では重水素化された $\text{H}_3^+$ が主なイオンとなっている。 $\text{DCO}^+$ は中心面のすぐ上層部分で最も存在度が高くなる。一方、 $\text{HDO}$ も中心面のすぐ上の層で最も多く存在すると考えられるが、モデルから予測される存在度は観測値よりも低い。 $\text{HDO}$ は昇華温度が高いため、観測値を説明するにはダスト表面からの非熱的な脱着過程が必要である。

原始惑星系円盤は空間的広がりが分子雲コアなどと比べて小さいので、円盤の分光観測は現在の電波望遠鏡の性能ぎりぎりいっばいの厳しいものである。特に $\text{H}_2\text{D}^+$ 、 $\text{HDO}$ の輝線プロファイルは回転円盤から予想されるふたこぶ型をしておらず、検出を疑問視する議論もある。また望遠鏡のビームサイズが大きいため、彗星形成領域(5–30AU)よりも外側の領域からの情報しかとらえられない。今後新しい望遠鏡でより高感度、高空間分解能な観測が望まれる。

まず $\text{H}_2\text{D}^+$ は近い将来SMA(Submillimeter Array)

図2：原始惑星系円盤(半径300AU)での温度・密度(上段)と気相分子組成(下段)の鉛直分布



での追観測が期待できる。SMAはスミソニアン天文台と台湾中央研究院が共同でマウナケア山頂に建設したサブミリ波を観測する電波干渉計である。干渉計は複数の望遠鏡を組み合わせることによって高い空間分解能を実現する。 $\text{H}_2\text{D}^+$ を検出した単一望遠鏡のビームサイズが25"程度であるのに対し、SMAの同じ周波数帯でのビームサイズは0.3"程度である。おうし座分子雲中にある円盤を観測する場合、0.3"は42AUに相当する。高い空間分解能は円盤内での分子の分布を調べる上で重要であるが、実質的に観測感度を上げることにもなる<sup>\*1</sup>。SMAはすでに稼動しておりCN、HCNなどさまざまな分子輝線で円盤の高空間分解能観測が行われている。 $\text{H}_2\text{D}^+$ 輝線を含む周波数帯の分光計は現在開発中である。

さらに2012年にはALMAが本格的な運用を開始する。ALMAとは北米・ヨーロッパ・日本の国際共同プロジェクトで、チリのアタカマ砂漠に建設中の巨大電波干渉計である。SAMが直径6mのアンテナを8台組み合わせているのに対して、ALMAは12mのアンテナを64台組み合わせる。おうし座分子雲にある円盤ならば数AU程度の空間分解能で輝線強度分布を観測できるので、重水素比だけでなく円盤内での物質進化過程の詳細な観測が期待できる。

## 4. 謝辞

本稿執筆の機会を与えてくださった北海道大学低温科学研究所の渡部直樹博士、有益な査読コメントを下さいました北海道大学理学部の倉本圭博士に感謝いたします。

## 参考文献

- [1] Aikawa, Y. et al., 2005, ApJ 620, 330.

\*1: ビームサイズが円盤よりも大きいと、信号がビームサイズで“薄められて”しまう。これを beam dilution という。ビームサイズが小さくなり円盤直径以下のサイズになれば信号が薄まらなくなる。

- [2] Caselli, P. et al., 2003, A&A 403, L37.
- [3] Roberts, H. et al., 2003, ApJ 591, L41.
- [4] Vastel et al., 2004, ApJ 606, L127.
- [5] Osamura, Y. et al., 2005, ApJ 621, 348.
- [6] Parise, B. et al., 2004, A&A 416, 159.
- [7] van Dishoeck et al., 2003, A&A 400, L1.
- [8] Ceccarelli, C. et al., 2005, ApJ 631, L81.
- [9] Ceccarelli, C. et al., 2004, ApJ 607, L51.
- [10] Aikawa et al., 2002, A&A 386, 622.
- [11] van Zadelhoff et al., 2003, A&A 397, 789.
- [12] Ohishi, M. et al., 1992, in *Astrochemistry of Cosmic Phenomena*, ed. P.D. Singh (Dordrecht: Kluwer), 171.
- [13] Ehrenfreud, P. & Shutte, W.A. 2000, in *IAU Symp. 197, Astrochemistry: From Molecular Clouds to Planetary Systems*, ed. Y.C. Minh & E.F. van Dishoeck (San Francisco: ASP), 135.
- [14] Saito, S. et al., 2002, ApJ 569, 836.
- [15] Caselli, P. et al., 2002, ApJ 565, 344.
- [16] Bacmann, A. et al., 2003, ApJ 585, L55.
- [17] Ceccarelli, C. et al., 2001, A&A 372, 998.
- [18] Parise, B. et al. 2004., A&A 416, 159.