

星・惑星系形成領域における化学反応ネットワークモデル

相川祐理

東京大学大学院理学系研究科天文学専攻

http://www.astron.s.u-tokyo.ac.jp/members/doa/aikawa_yuri/

本講演では、星形成領域の化学反応ネットワークモデルの現状を概観する。星間空間では分光観測によって 200 種を超える分子が検出されている[1]。星間物質の組成は、ガスの冷却効率を決めるだけでなく、天体現象の観測的指標として重要である。また星・惑星系形成領域における分光観測は、惑星系の材料物質の解明にもつながる[2]。星間ガスは希薄なため、その組成は非平衡に変化している。星間物質組成の理論的解明には、星間で起こり得るさまざまな化学反応を列挙した化学反応ネットワークモデルが用いられる。

化学反応ネットワークモデルには数千個の素反応が含まれ、反応は気相反応と固相反応に大別できる。気相反応については1980年代からイオン-分子反応を軸とする反応ネットワークモデルが構築され、主要な分子種の存在比、異性体比、同位体比などの再現に成功している[3]。近年ではkidaプロジェクト (<https://kida.astrochem-tools.org/>)において、実験値や量子化学計算結果を参照したweb データベース作成が行われているが、解離性再結合や光解離反応の分岐比など、実験や量子化学計算の容易でない反応を中心に不定性が残されている。

星間空間で分子の多く存在する分子雲は 10 K と低温であり、そこでは星間ダストの表面に分子が凍結し、水を主成分とする氷マントルが形成されている。氷マントル内には炭素や窒素なども含まれ、さまざまな固相反応が起こる。特に近年星形成領域で観測の進んでいるグリコールアルデヒドなどの大型有機分子の生成には固相での反応が重要と考えられている。固相反応の効率は、反応の活性化エネルギーだけでなく、固相での原子や分子の拡散率、反応余剰エネルギーの散逸過程にも依存する[4][5]。各素過程について実験や量子化学計算による解明[6]が試みられる一方、不均一な固体表面での拡散等をどのように数値モデル化するかという課題も残されている。

[1] McGuire, B. A. 2018 ApJS 239 17

[2] Aikawa, Y., Furuya, K., Yamamoto, S., Sakai, N. 2020, ApJ, 897, 110

[3] Yamamoto, S. “Introduction to Astrochemistry” 2017, Springer

[4] Furuya, K. et al. 2022, ApJL, 933, L16

[5] Garrod, R. T. 2022, ApJS, 259, 1

[6] Molpeceres, G. et al. 2021, J. Phys. Chem. Lett. 2021, 12, 44, 10854-10860