

領域略称名：宇宙分子進化
領域番号：2507

平成27年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る中間評価報告書

「宇宙における分子進化：星間雲から原始惑星系へ」

(領域設定期間)

平成25年度～平成29年度

平成27年6月

領域代表者 (北海道大学・低温科学研究所・教授・香内 晃)

目 次

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要	5
2. 研究の進展状況	7
3. 審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況	11
4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	13
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公开发表等）	17
6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	22
7. 若手研究者の育成に関する取組状況	24
8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	25
9. 総括班評価者による評価	26
10. 今後の研究領域の推進方策	28

研究組織

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
X00	251080001 宇宙における分子進化:星間雲から原始惑星系へ	平成25年度～ 平成29年度	香内 晃	北海道大学・低温科学研究所・教授	8
A01計	251080002 分子雲における氷・有機物生成	平成25年度～ 平成29年度	香内 晃	北海道大学・低温科学研究所・教授	7
A02計	251080003 原始惑星系における有機物生成とその進化	平成25年度～ 平成29年度	永原 裕子	東京大学・理学系研究科・教授	8
A03計	251080004 宇宙における分子生成と物質進化	平成25年度～ 平成29年度	深澤 倫子	明治大学・理工学部・准教授	5
A04計	251080005 原始惑星系の化学的多様性とその進化	平成25年度～ 平成29年度	山本 智	東京大学・理学系研究科・教授	9
A05計	251080006 宇宙有機物の構造と同位体	平成25年度～ 平成29年度	塚本 尚義	北海道大学・理学研究院・教授	6
計画研究 計6件					
A01公	26108501 星間塵表面反応による有機分子の重水素濃集:炭素鎖伸長による濃集度の変化	平成26年度～ 平成27年度	大場 康弘	北海道大学・低温科学研究所・助教	1
A01公	26108508 星間ダスト表面におけるアモルファス氷の強誘電性と触媒機能	平成26年度～ 平成27年度	杉本 敏樹	京都大学・理学研究科・助教	1
A01公	26108510 鉱物組成クラスターの気相反応による表面反応機構の探究	平成26年度～ 平成27年度	荒川 雅	九州大学・理学研究院・助教	1

A01 公	26108511 高精度理論計算による 星間雲分子の紫外線ス ペクトル、解離反応機構 および同位体効果	平成26年度～ 平成27年度	ダニエラチェ セバスチャン	上智大学・理工学部・講師	1
A01 公	26108514 星間分子雲における炭 素フラレンへの水素 付加反応の解明	平成26年度～ 平成27年度	中井 陽一	国立研究開発法人理化学研究所・ 研究員	2
A01 公	26108504 水クラスター表面で起 こる光反応過程のレー ザー分光研究	平成26年度～ 平成27年度	松田 欣之	東北大学・理学研究科・助教	1
A02 公	26108505 未同定赤外バンドのキ ャリアの同定と重水素 化による赤外スペクト ルへの影響の調査	平成26年度～ 平成27年度	左近 樹	東京大学・理学系研究科・助教	1
A03 公	26108502 星間物質表面上での水 素分子の生成反応と核 スピン転換に関する理 論的研究	平成26年度～ 平成27年度	國貞 雄治	北海道大学・工学研究院・助教	1
A03 公	26108503 木星形成後の微惑星衝 撃波による物質進化モ デルの構築	平成26年度～ 平成27年度	田中 今日子	北海道大学・低温科学研究所・研究 員	2
A03 公	26108516 星間化合物の量子スペ クトルのシュレーディ ンガー・レベルの計算	平成26年度～ 平成27年度	中嶋 浩之	特定非営利活動法人量子化学研究協 会・研究員	1
A04 公	26108506 無極性直線炭素鎖分子 のサブミリ波天文観測 のための最低変角振動 遷移の実験室分光	平成26年度～ 平成27年度	金森 英人	東京工業大学・理工学研究科・准教 授	3
A04 公	26108507 星間分子研究のための 低周波数帯の高感度高 速高分解能マイクロ波 分光計の製作	平成26年度～ 平成27年度	小林 かおり	富山大学・理工学研究部・准教授	1

A04 公	26108512 原始惑星系円盤のスノーラインへの観測的制限	平成26年度～ 平成27年度	本田 充彦	神奈川大学・理学部・助教	1
A05 公	26108509 マルチターン飛行時間型質量分析計による隕石中に存在する有機物の高精度測定	平成26年度～ 平成27年度	青木 順	大阪大学・理学研究科・助教	1
A05 公	26108515 真空紫外マイクロビームを用いた円二色性計測による隕石中のキラリティ分析手法の検証	平成26年度～ 平成27年度	田中 真人	国立研究開発法人産業技術総合研究所・研究員	1
公募研究 15 件					

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要（2ページ程度）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を発展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

概要

星間分子雲から原始惑星系における分子進化を物質科学的に研究する新領域を立ち上げる。宇宙で最も大量に存在する元素(H, O, C, N)からなる固体物質（氷および有機物）の形成・進化に着目し、実験、観測、理論、分析等の多様な手法で、分子進化の全体像を描く。これらによって、これまでの惑星形成論で不十分であった化学的視点に着目した研究を推進する。

①どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる新たな研究領域」であるか

宇宙でO, C, Nは、H, Heに次いで多い元素であり、H, O, C, Nは、10K程度の星間分子雲においては氷や固相の有機分子となっている。これらの物質は地球型惑星を構成している鉱物と比べて一桁存在量が多いだけでなく、進化史を記録している**ロゼッタストーン**でもあり、格段の重要性を有している。これまでは、氷や有機物の研究は、天文学、物理化学、隕石学などの分野で独立しておこなわれ、しかもそれぞれが**分断**されていた。これらを**統合**することで、新たな学問領域の展開が期待できる。本領域では、それぞれの分野で世界の先端を担っている我が国の観測・実験・理論・分析などによる研究を**高度に融合**することで、**原始惑星系進化にともなう氷や有機物の進化を明らかにし、自然科学のあらゆる分野を統合する新しい学術領域を開拓する。**

②研究の学術的背景

これまでの惑星形成過程の研究では、力学的な視点が主で、化学的な側面からの研究は非常に少なかった。最近、系外惑星や氷衛星の大気に注目が集まっており研究の必要性が指摘されているにもかかわらず、これら大気の前駆物質である氷や有機物の研究は限られていた。氷や有機物は環境（温度、光子場）に敏感なので、原始星円盤の環境を探るプローブとして最適であるが、適切な観測手段がなかったため観測はできなかった。しかし、ALMA (Atacama Large Millimeter/submillimeter Array)望遠鏡が本格運用フェーズに入り、原始星円盤が高分解能で観察できるようになった。これまでにない質と量のデータの入手が期待され、この分野の研究は、時宜を得ているだけでなく大きな発展が見込まれている。

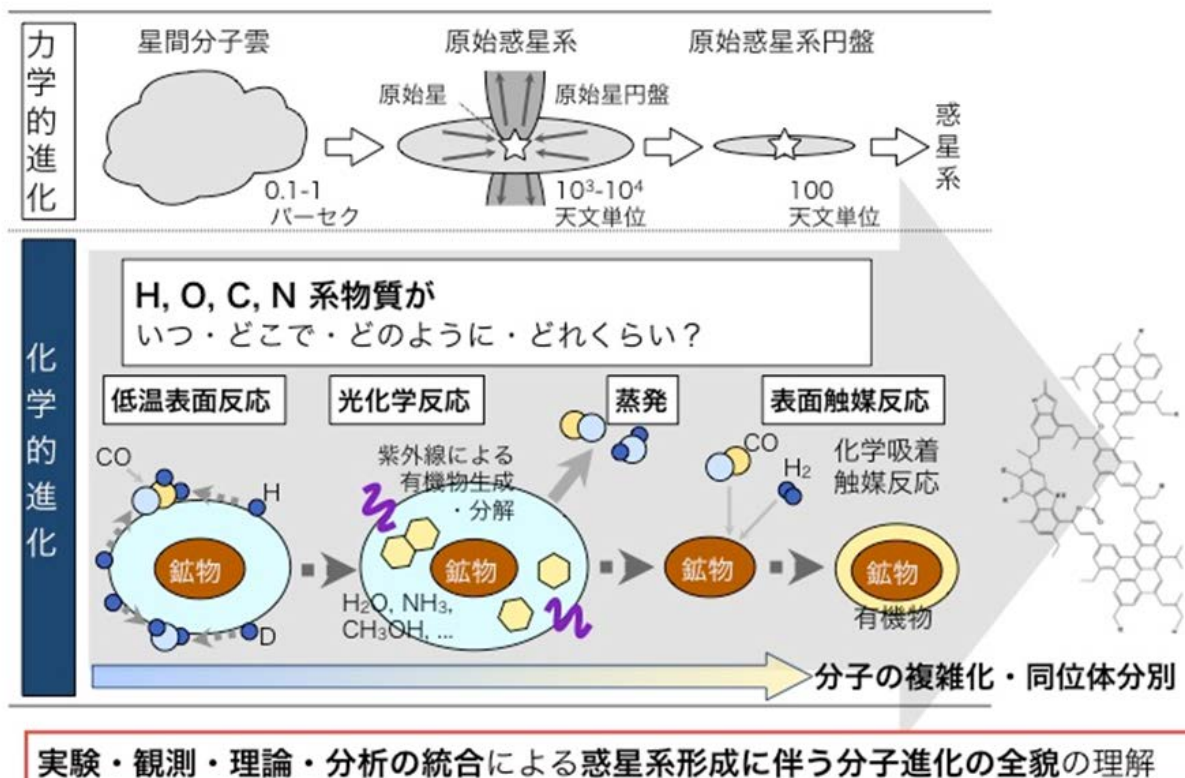


図1. 星間分子雲から原始惑星系に至る分子進化

星間分子雲では、星間塵表面での原子反応や光化学反応により、氷や有機物が生成される。これらの生成過程は室内での模擬実験により、代表者たちのグループによって精力的に研究が行われている。また、多種の不飽和有機物が分担者の電波観測により発見され、**H, Nの重い同位体が濃集**していることが明らかになった。しかし、これらの物質が原始太陽系星雲でどのように進化して来たかに関してはほとんど研究が行われていない。

最近、炭素質隕石や彗星塵などの地球外物質中に分子雲や原始惑星系の外縁部起源の有機物が見つかるようになってきている。これらの物質中にも、**H, Nの重い同位体が濃集**している。これらの研究から、天文観測だけではわからない分子雲の情報を地球外物質の分析から読み取ることができることを示している。ロゼッタストーンを紐解く（氷・有機物の生成・進化過程の解明）には、**H, C, O, Nの同位体が強力なツールである**ことが認識されてきた。

このような状況にあって、今求められていることは、**星間分子雲から原始惑星系で C-H-O-N からなる物質がどのように進化したかの理解**である。これらの元素を含む系の反応は、温度・圧力が低いだけでなく紫外線の影響等もあり、非平衡である。したがって、物理化学的基盤に立った実験的・実証的研究が必要になる。具体的には、氷・有機物を、物質科学的手法で生成効率（反応速度）、生成経路、同位体分別機構を調べることにより、星間分子雲から原始惑星系に至る環境（固体とガスの化学・同位体組成）の変化を明らかにする。このような研究を展開するにあたっては、これまでそれぞれの研究分野や対象毎に分断されていたものを**高度に統合**することが必須である。

③研究期間内に何をどこまで明らかにしようとするのか

分子雲から原始惑星系に至る分子進化の物理化学的手法による解明

- 1) 分子雲における表面原子反応・光化学反応の反応速度定数を測定するとともに、これらの反応によって生成される氷・有機物の化学組成、同位体の特徴を明らかにする。
- 2) 原始惑星系での氷・有機物生成・進化プロセスに着目し、①氷・分子雲有機物が加熱によりどのように変化するか（特に、蒸発ガスの化学組成に着目）、②触媒（表面）反応の反応速度定数を測定するとともに、生成される有機物の化学組成、同位体の特徴を明らかにする。
- 3) 電波望遠鏡(ALMA, ASTE 等)を用いて、有機分子の進化とその多様性を系統的に観測する。

始原的地球外物質（ロゼッタストーン）の解読

- 4) 始原的地球外物質中の有機物の化学・同位体組成の分析から、分子雲や原始惑星系起源の有機物を見出しその特徴を明らかにする（物的証拠の収集）。

分子進化のシナリオ作成

- 5) 1) - 3) のデータを用いるとともに、4) を満足するように、分子雲から原始惑星系に至るまでの氷・有機物の起源・進化（分子進化）を明らかにする。特に、分子進化の多様性を生む原因となる物理条件の解明に重点をおく。

本領域の大きな特長は、実際に手を動かして研究を行っている若手研究者が主役を担う点にある。とりわけ、実験、理論、観測においては、若手研究者がリーダーシップをもって、世界最先端の研究を切り拓くことで、次世代のリーダーの育成を図る。ベテランの班長は、若手研究者が研究しやすい環境整備にも気を配る。

2. 研究の進展状況〔設定目的に照らし、研究項目又は計画研究ごとに整理する〕（3ページ程度）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、現在までにどこまで研究が進展しているのか記述してください。また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らして、どのように発展したかについて研究項目又は計画研究ごとに記述してください。

各班ともきわめて順調に当初の計画通りの研究成果をあげている。さらに、いくつかの研究では、当初の想定をはるかに超える画期的な研究成果もでている。

【研究項目A01】分子雲における氷・有機物生成（分子雲実験班）

分子雲に存在する低温の星間塵でおこる化学反応について系統的・定量的室内実験をおこない、表面原子反応および光化学反応による分子生成過程の全容解明を目的とする。

1. アモルファスH₂O氷の表面構造観察

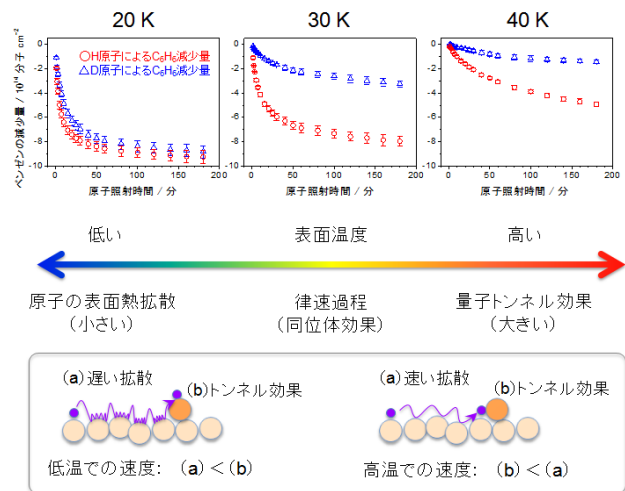
【目的】分子雲の化学反応場としての役割を果たす星間塵の表面を覆うアモルファス氷表面の幾何構造（星間化学における最大のブラックボックスとなっている）を直接観察する。

【進展状況】北海道大学で開発した極低温超高真空透過型電子顕微鏡（TEM）および極低温超高真空原子間力顕微鏡（AFM）を用いて、今まで技術的に困難であった10-100 Kのアモルファス氷の可視化に世界で初めて成功し、アモルファス氷は結晶とは全く異なるナノ構造（柱状、雪だるま状）を持つことがわかるなど、顕著な成果が得られている。

2. 表面に吸着した原子による化学反応

【目的】10 Kでは軽いH原子も星間塵の表面に物理吸着し、量子トンネル効果により活性化エネルギーを透過して反応がすすむ。しかし、量子トンネル表面反応におけるアモルファス表面の触媒効果や、反応速度論・動力学はほぼ不明である。そこで量子トンネル表面反応の表面温度依存、同位体効果(H, D原子)、構造依存(アモルファス・結晶)を系統的に調べる。

【進展状況】幅広い温度について実験が可能で、かつアモルファス・結晶を作り分けられる固体ベンゼンを用いて、量子トンネル表面反応に関する反応速度論・動力学の一般的描像を獲得することに成功するなど、当初の計画をはるかに上回る画期的な成果をあげている(図2)。



3. H₂Oや他の分子(CH₃OH, NH₃など)を含む氷の光化学反応

【目的】氷および他の分子を含む氷星間塵が低密度雲や星近傍に運ばれると、光化学反応により複雑な構造をもつ有機物ができる。この物理化学過程を調べるために、新規光化学反応実験装置を開発し、分子雲を模した種々の氷への紫外線照射実験をおこなう。

【進展状況】新規光化学反応実験装置の開発が完了し、模擬分子雲有機物の作製が順調に進んでいる。残渣有機物の網羅的的化学分析と形態観察をA05分析班と共同で行っている。残渣有機物のナノ構造を明らかにするなど先駆的な結果が得られ始めている。

【研究項目A02】原始惑星系における有機物生成とその進化（原始惑星系実験班）

原始惑星系円盤初期において、アモルファスケイ酸塩および金属微粒子を触媒とする化学反応により分子がどの程度まで進化するかを、実験的・理論的に研究することが目的である。

1. アモルファスケイ酸塩薄膜の作製

【目的】触媒反応実験の基盤となるアモルファスケイ酸塩薄膜を作成する技術を確立する。

【進展状況】各種薄膜作製法により、最適な基板製作方法を決定した。作製した基板を本班および他班の分子生成実験に供している。同時に、SPring-8におけるその場観察実験用成膜にも成功した。このように、研究は計画通り順調に進展している。

面構造の役割の評価の必要性が浮上している。

2. 表面における分子吸着素過程の解明

【目的】アモルファスケイ酸塩表面における分子の吸着過程を理論的に解明する。

【進展状況】まず、結晶フォルステライトの表面エネルギーを第一原理的に決定することに成功した。従来データの存在しないラフ面 (100) 面のデータを得ることに成功し、フラット面に比べ 2.5 倍程度の高い表面エネルギーを持つことを明らかにした。他方、天然のフォルステライト負結晶（結晶の中にある穴）の観察から、(100) 面が安定面である可能性も得ており、分子吸着に対する異方性と表

3. 原始惑星系円盤における触媒反応実験

【目的】微粒子表面へのガス分子吸着（触媒）実験のための実験装置を開発する。

【進展状況】当初目標とした実験条件をはるかに超える温度・圧力条件 ($T=30-800\text{K}$, $P=10^{-3}-10^2\text{ Pa}$) をカバーでき、分子雲から原始惑星系円盤までの条件変化をシームレスに行うことが可能な装置の開発に成功した。本装置を用い、鉄、ニッケルを触媒とし、 300K , 10^2 Pa で水素と一酸化炭素の混合ガスからエタンを合成することに成功した。原始惑星系円盤条件における有機分子の生成は世界初である。このように、研究は計画通り順調に進展している。

4. 結像型軟 X 線分光装置の開発

【目的】有機物生成過程のその場観察のために、非色収差光学系で構成される高空間分解能の結像型軟 X 線分光装置（顕微 XANES 装置）を開発する。

(XANES: X-ray Absorption Near Edge Structure)

【進展状況】フレネルゾーンプレートを用いた結像型顕微 XANES 装置を開発し、SPring-8 に設置した。また、空間分解能 230nm の画像取得にも成功した。既存の顕微 XANES 装置は走査型のため、画像の取得に秒単位の時間を必要としているのに対して、本装置は数 ms で可能であり、触媒反応のその場観察への適用が可能になった。さらに、光学系をより明るくし空間分解能を高めるために、色収差のないウォルターミラー光学系の開発も並行して進め、そのための試作品を作製している。このように、研究は計画通りに順調に進展しているが、現時点の成果だけでも非常に意義深い重要な成果であると考えている。

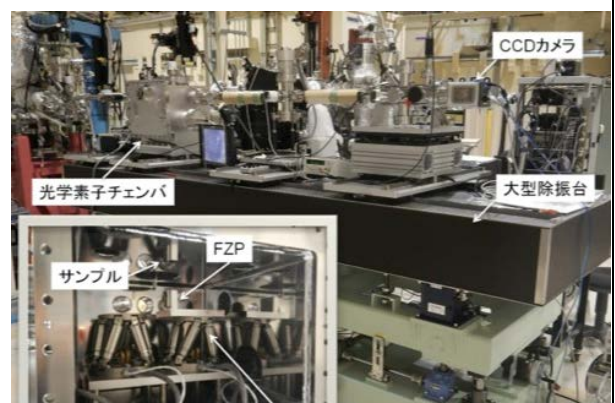


図 3. 開発した顕微 XANES 装置

5. 原始惑星系円盤初期進化に伴う有機物の変化

【目的】原始惑星系円盤初期の温度、密度の時間発展と、星間塵の移動にともなう化学組成の変化を理論的に解明する。

【進展状況】原始惑星系円盤初期進化における温度、密度の動径方向および鉛直方向の時間発展と、分子雲由来のケイ酸塩-有機物粒子の移動にともなう化学組成の変化を整合的に追跡するコード開発を、理論班との共同により進めている。

【研究項目A03】宇宙における分子生成と物質進化（理論班）

古典分子動力学法、ダイレクト・アブイニシオ分子動力学法、第一原理法、数値シミュレーション等の理論的手法を用いて、星間分子雲から原始惑星系に至る過程で起こる氷および有機物の生成・進化過程をマイクロおよびマクロな視点から解明することを目的としている。

1. アモルファス表面構造の解明

【目的】分子動力学法により、分子雲・原始惑星系における主要な反応場であるアモルファス状態の水や炭素質物質、ケイ酸塩の表面構造を解明する。

【進展状況】まず、アモルファス氷の分子動力学計算を行い、表面構造を解析した。この結果から、アモルファス氷表面の構造および分子振動状態が明らかになった。次に、主要な鉱物であるアモルファスフォルステライトについて、生成条件を検討し、バルク構造を解析した。この結果を基に、表面構造の解析を進めている。このように、研究は計画通り順調に進展している。

2. アモルファス表面における吸着・拡散および表面反応機構の解明

【目的】ダイレクト・アブイニシオ分子動力学法、第一原理法により、微粒子表面に吸着した低分子の挙動を解析し、吸着確率、拡散定数、反応速度定数等を求める。

【進展状況】氷、多環芳香族炭化水素、および炭素クラスターの表面と、水素原子をはじめとする基本化学種の相互作用および反応ダイナミクスについて理論的に研究した。具体的には、(A) 氷表面上に吸着した水素原子、酸素原子、窒素原子の拡散、(B) 多環芳香族炭化水素-水素原子の相互作用、および(C) 氷クラスター表面へ吸着した分子(水ダイマー、 SO_2 、 CO_2 分子等)の光反応ダイナミクスである。これらの系の理論計算により、氷表面における水素原子の拡散の活性化エネルギー等の知見を得た。このように研究は計画通り順調に進展している。

3. 原始惑星系における低分子の熱変性過程の解明

【目的】数値シミュレーションにより、原始惑星系における加熱に伴う有機物の部分蒸発および再凝縮の過程を解明する。

【進展状況】原始星円盤における衝撃波による氷微粒子の加熱・蒸発現象に関する理論的研究を行なった。代表的な氷成分である CO 、 CO_2 、 H_2O 組成の氷に関して、その平衡蒸気圧や放射係数のモデル化を行なった。この氷微粒子モデルを一次元平行平板定常衝撃波加熱モデルに適用し、数値計算を行なうことで、幅広い衝撃波条件(衝撃波速度、ガス密度)に対して氷微粒子蒸発の有無を調べた。

4. 星間分子雲および原始惑星系における分子進化の過程の解明

【目的】化学反応ネットワーク計算により、星間分子雲および原始惑星系に至る長期スケールの分子進化シナリオを構築する。

【進展状況】観測班により発見された円盤形成に伴う SO 放射現象について、円盤への降着衝撃波に伴う SO 等揮発性物質の昇華モデルを構築した。塵表面反応については、実験結果に基づくモデルの開発を進め、これまでに行ってきた原始惑星系円盤内での有機分子生成の見直しを行っている。また、原始惑星の形成に伴う氷微惑星蒸発が円盤化学構造に与える影響およびその観測可能性に関する研究を推進している。

【研究項目A04】原始惑星系の化学的多様性とその進化(観測班)

本研究の目的は、星形成から惑星系形成に至る過程における有機分子の進化を電波観測によって明らかにすることにある。特に、近年明らかになってきた化学的多様性の起源と進化に着目して研究を進めている。

1. 様々な進化段階にある原始星天体における化学的多様性の統計的研究

【目的】原始惑星系における化学組成の多様性を明らかにし、統計的観点からその起源に迫る。

【進展状況】まず、多様性の1つのプロトタイプであるWCCC(Warm Carbon Chain Chemistry)天体について、野辺山45 m電波望遠鏡やIRAM 30 m電波望遠鏡によるラインサーベイプロジェクトを推進し、その全貌を明らかにしつつある。また、一つの領域について、WCCC天体とその対極のプロトタイプであるホットコリノ天体がどのように分布しているかを統計的に調べるプロジェクトをスタートさせるなど計画通り順調に進展している。

2. ALMAを用いた高解像度観測による原始星近傍の物理・化学構造の解明

【目的】ALMA観測により原始星近傍の物理・化学構造を解明する。

【進展状況】WCCC天体の代表であるL1527についてALMAの観測を行い、回転しつつ落下する原始星エンベロープの遠心カバリアを発見し、そこで化学組成が大きく変化する様子を捉えることに成功した(図4)。同様の研究をIRAS15398-3359などでも進展させつつある。ALMAのCycle 2の観測公募では、これらに関して5件の観測提案が採択(ランクB以上)されており、更なる発展が期待される。これまで、原始星エンベロープは静かに落ち込み、原始星円盤と連続的につながると思われてきたが、全く異なる状況であることがわかった。また、物理構造と化学構造を同時に観測できるとは誰も考えておらず、本研究による成果はいろいろの意味で画期的である。

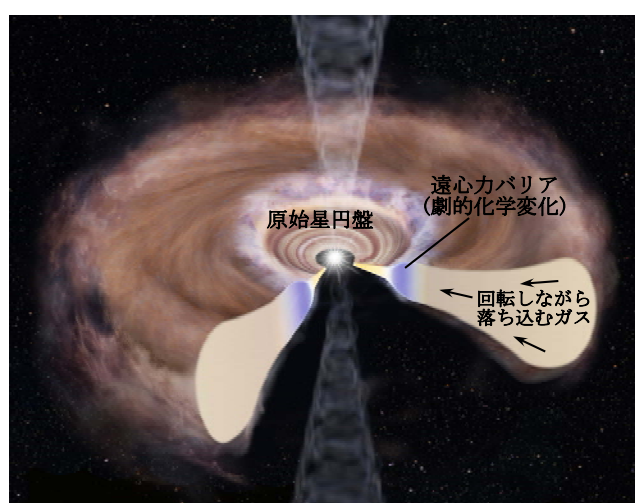


図4. 回転しながら原始星へ落ちこむガスのイメージ

3. ASTE望遠鏡搭載用観測装置の開発

【目的】ASTE 10 mサブミリ波望遠鏡に搭載するTHz 帯および230 GHz帯受信機を開発する。

【進展状況】THz帯受信機は主に基本的分子の重水素化物のスペクトル線を、230 GHz帯受信機では様々な有機分子のスペクトル線を観測できる。これらの受信機の開発は予定通り進んでおり、平成27年度にASTE 10 m望遠鏡に試験搭載される予定である。

【研究項目A05】宇宙有機物の構造と同位体（分析班）

有機化合物単位の構造解析・同位体分析により、宇宙有機物生成過程と分子構造との関係を解明することを目的としている。

1. 極微量宇宙有機物試料の世界最高感度の分子構造解析と同位体分析手法の開発

【目的】分子雲・原始惑星系環境合成有機物や炭素質隕石中の数10~100 μm (重量で1 μg 程度)領域にどのような有機化合物が分布するかを解明するための極微量分析法を開発する。

【進展状況】最新鋭の液体クロマトグラフ質量分析計 Orbitrap Q- Exactive を導入し、立ち上げが完了した。非生物的に生成する多様なアミノ酸のLC/ESI-MS法およびLC \times GC/IRMS法による分離同定の最適化と個別分子レベルでの炭素・窒素同位体分析法の開発を行った。宇宙アミノ酸を対象として、二次元HPLC法を開発した。また、同位体顕微鏡によるCHON元素の同位体分析とこれらの元素のミクロンオーダーの同位体マップ、濃度比マップの分析法を確立するなど予定通り順調に進展している。

2. 同位体トレーサーを用いた星間有機物生成経路の研究

【目的】分子雲実験班(A01)と共同で分子雲・原始惑星系模擬有機物を作製し、開発した分子構造解析と同位体分析を駆使して星間有機物生成経路の研究をおこなう。

【進展状況】紫外線照射実験生成物のLC/MS分析により、星間模擬環境下においてメタノール-アンモニア-水混合氷から多様な化合物群が生成することが確認された。実験生成有機物の形状は一様な膜状ではなくグロービュール状の有機物分子が縞状に分布する特異な形態をとることが判明した。また、有機分子と化学反応性の高いアンモニアガスの吸着・脱着プロセスにより、分子レベルでの窒素同位体分別に関する基礎過程の実験的評価を進めつつあり、当初の予定通り順調に進展している。

3. 隕石有機物と星間有機物をリンクするマーカー分子・マーカー官能基の探査

【目的】隕石有機物分子と分子雲分子・原始惑星系分子を繋げる新しいマーカー分子・マーカー官能基を探索する。

【進展状況】同位体顕微鏡を用いて炭素質隕石のマトリックスを観察し、重水素Dに濃縮した有機分子の形状・分布・重水素濃縮度を決定した。Murchison炭素質隕石の抽出有機化合物を液体クロマトグラフ/超高分解能質量分析計で分析し、様々な含窒素芳香族化合物(ピリジンやイミダゾール、ペリジンなど)とそれらの広範なアルキル同族体を見出し、アンモニアが存在するアルカリ条件下でのホルモース反応とアルドール縮合、さらにイミンと反応する隕石母天体上での生成メカニズムを提案した。南極産炭素質隕石の微粒子(50 μg)中のキラルアミノ酸分析を行った結果、対象とした13種全てのアミノ酸の存在が示され、エナンチオ過剰は認められなかった。小惑星上の有機物合成に重要な媒体である水溶液の同位体分析を行うなど予定通りに順調に進展している。

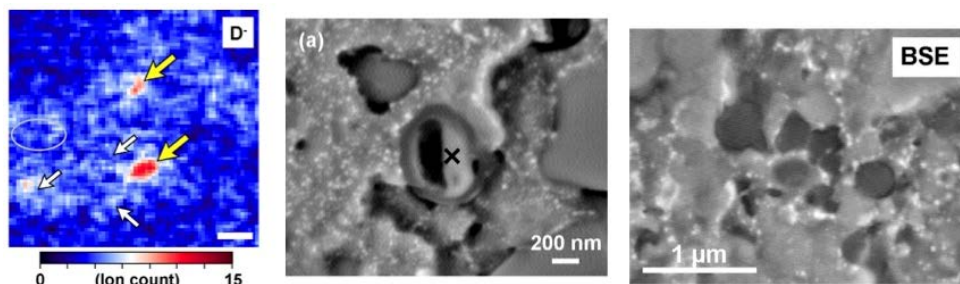


図5. 炭素質隕石中に点在するDに富む有機物(左)、環状グロービュール有機物(中)、有機物グロービュール集合体(右)

3. 審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況（2 ページ程度）

審査結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

平成 25 年 7 月 1 日付け理工系委員会主査からの審査結果の所見は以下の通りである。

本研究領域は、宇宙における星間雲から原始惑星系への分子進化を、物理化学的基盤に立って、実験、観測、理論の協力により解明しようという意欲的な提案である。ALMA 望遠鏡が利用できるなど、時宜を得た計画でもある。惑星系形成の力学的進化については多くの研究が行われているが、本研究領域では H, O, C, N 系物質に着目した化学進化の研究を行うところが新しく、既存の学問分野の枠に収まらない新規・融合領域の創成に適したもので、研究領域設定の必要性は高い。研究組織は、トップレベルの研究者が結集して研究手法の異なる計画研究を組織し、その有機的な連携によって物質進化の謎を解明するよう計画されており成果が期待できる。また、「星間分子雲から原始惑星系初期の分子進化」に絞り込んでいる点も評価できる。研究経費については、研究計画に沿ってそれぞれの研究機関へ、実験に必要な設備装置の導入のための予算が計上されており妥当である。なお、各計画研究の成果がどのように有機的に関連してシナジー効果を生み出すのか、より一層明確にする必要がある。

所見の指摘（最後の下線部分）を受け、次の基本的考えに基づき、領域を運営している。共同研究や連携研究による単なる研究の効率化や最適化だけに留まるのではなく、真の有機的連携によって、全く新しい視点からこれまでにない発想を得ることを特に重視する。

まず、キックオフミーティングにあたる第一回の全体集会では、各班長にこのような視点からの哲学を語って頂くようお願いし、若手研究者はそれを十分に認識することができたようである。全体集会に参加して頂いた学術調査官からも、研究領域の開始時にこのような形式の会合を持ったことに対して評価するコメントを頂いた。その後は、下記に示すような方策を講じて、シナジー効果を生み出す努力を継続している。

分野横断的ワークショップの開催

上記の哲学を実現するための一つの方策として、各計画研究に共通するテーマや複数の班が密接に関連するテーマをとりあげて徹底的に議論する、分野横断的ワークショップを開催した。研究の進展に応じて随時開催する機動性も兼ね備えている事がもう一つの特長である。総括班は目配りをするだけに留め、テーマや内容は若手リーダーの自主性に任せた。

平成 25 年度（括弧内はリーダー）

① 宇宙分子進化キックオフ（橘）

領域の全体集会では困難である徹底した議論を行って、分野の壁を取り払うとともに共通語を育む努力をし、今後の連携研究の方向性を議論した。

② 宇宙有機物の構造と分析（高野）

有機物試料を作製する分子雲および原始惑星系実験班のメンバーが、試料を分析するための装置が設置してある福岡工大に赴き、実際の分析を見学し、どのような試料がどの程度の量必要かを分析の現場で理解した。

③ フォルステライトの構造（深澤）

今回初めて宇宙分子進化の研究に参画する物理、化学分野の理論屋にとってなじみのないケイ酸塩鉱物を理解するため、さらに将来アモルファスケイ酸塩を研究するうえで基礎となるかんらん石（フォルステライト、 Mg_2SiO_4 ）の基礎を理解するために開催し、解決すべき問題点を整理して紹介・議論した。

平成 26 年度

④ フォルステライトの表面構造と触媒作用（高橋）

フォルステライトの構造ワークショップ時に出された課題の検討状況を持ち寄り、今後の研究の方向性を議論した。

⑤ 氷・有機物の生成と進化（羽馬）

各班長が領域全体の現状を理解し、今後の連携研究をより実効的にするための方策を議論する目的で、総括班メンバーだけに限ったワークショップを設定した。各班長が相当な時間をかけて研究の現

状報告をおこない、さらに徹底的な議論をすることで、領域全体の現状理解を深めるとともに、今後の連携研究の方向性を議論した。

⑥ 高輝度放射光を用いた分子進化研究（為則）

SPring-8 で開発・設置された新規結像型顕微 XANES 装置を見学するとともに、表面化学反応研究の現状を理論と実験の両面から報告・議論した。

⑦ 宇宙分子進化研究の進展状況とその評価（橘）

総括班メンバーが担当者に研究の現状を紹介するとともに、評価担当者から今後の運営方針等に関する助言を頂いた。

ワークショップには、複数の計画研究班のメンバー、公募研究代表者、大学院生などが参加し、徹底的な議論から新たな萌芽的連携研究が相当数生まれている。

異分野への参入

ワークショップでの議論は上記のように非常に有益であるが、さらに一歩進めて、これまでの研究分野を離れて他分野へ参入することが、これまでにない発想で旧来の研究を打破する鍵になる。特に、若い研究者ほど新しい物事の吸収能力に優れているので、博士研究員等の若手に異分野への実質的参入（相当深いコミット）を強く推奨している。

・分析班の博士研究員（同位体分析が専門）→分子雲実験班の光化学反応実験に参画→これまで全くなされてこなかった有機物の顕微鏡観察を実施→残渣有機物のナノ構造の発見→粘弾性測定への展開→有機物に覆われた微粒子の合体成長過程の解明へ

（単なる連携研究だと、実験班で試料の作製→分析班で分析、となり単なる化学分析で終了してしまう。）

・地球物理学専門の博士研究員→有機物の分析的研究へ参画→分析結果の新規解析法の開拓
・薬学の専門家が隕石有機物分析へ参画→隕石中のアミノ酸を D 体, L 体へ分離, それらのアトモル (10^{-18} mol) オーダーでの分析を実現→これまでの定説 (L 体過剰) の見直しへ

迅速な情報伝達による世界に先駆けた研究展開

研究成果がまだ予察的な段階でも、ワークショップ等で他分野の研究者と議論することにより、世界に先駆けた新たな研究展開を図ることが可能になる。以下に例を示す。

・原始星エンベロープの遠心力バリア発見（観測班）→化学反応ネットワーク計算（理論班）(Sakai et al.2014,Nature) →衝撃波による蒸発計算（理論班）

・重水素原子との反応によるグリシンのキラル化発見（分子雲実験班）(Oba et al.2015.Chem.Phys.Lett.) →観測班との議論→マイクロ波スペクトル測定→ALMA 観測提案（分子雲実験班, 観測班）

ここでは、相当数実施されている連携研究のごく一例をあげたに過ぎず、詳細は「6. 研究組織と各研究項目の連携状況」を参照されたい。

4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）[研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する]

（3 ページ程度）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。

【研究項目A01】分子雲における水・有機物生成（分子雲実験班）

1. 星間塵の表面を覆うアモルファス（非晶質） H_2O 氷の構造解析

極低温超高真空TEMを用いて、アモルファス H_2O 氷の可視化に世界で初めて成功し、ナノスケールで不均一な構造を明らかにした。さらに、極低温超高真空AFMを用いて45 Kのアモルファス氷の最表面のナノ構造について観察をおこない、5 nm程度の塊の凝集体であることを明らかにした(図6)。過去の研究からアモルファス氷は多孔質であり、表面積が大きいことが知られていたが、本研究により、その起源が不均一なナノ柱状構造にあることが分かった。

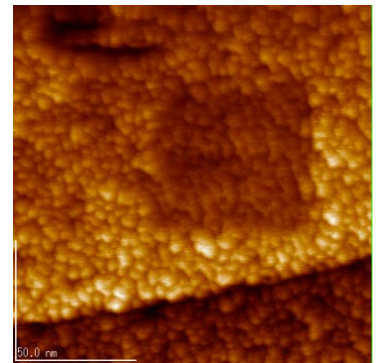


図6. アモルファス氷のAFM像

2. 表面に吸着した原子による化学反応

表面トンネル反応の研究に理想的な性質を持つ固体ベンゼン(C_6H_6)に低エネルギーのH原子を照射する実験を行った。ベンゼンへのH原子付加反応は高い反応障壁が存在するにもかかわらず、量子トンネル効果により、環状飽和炭化水素であるシクロヘキサン(C_6H_{12})が生成することがわかった。芳香族炭化水素は星間塵の核となる物質であるため、この結果は今まで化学的に安定とされていた星間塵の核そのものがH原子と反応を起こすことを示唆する。さらに構造依存(アモルファス・結晶)、表面温度依存(10-50 K)、同位体効果(H/D原子)を調べることで、量子トンネル表面反応におけるアモルファス表面の触媒効果を解明し、反応速度論の一般的な描像(原子のトンネル効果と表面熱拡散のバランスで反応速度と速度論的同位体効果が決まること)を明らかにした。

3. H_2O や他の分子(CH_3OH , NH_3 など)を含む氷の光化学反応

氷と有機分子に覆われた星間塵が低密度雲や星近傍に運ばれると、光と加熱により複雑な有機物ができる。この過程を調べるために、新規光化学反応実験装置 PICACHU (Photochemistry in Interstellar Cloud for Astro-Chronicle in Hokkaido University) の開発を行った。装置の開発は完了し、模擬分子雲有機物の作製をおこない、分析班と共同で分析を進めている。特筆すべきは、残渣有機物が10 nm程度の粒状組織の集合体であることが初めて分かったことである。

【研究項目A02】原始惑星系における有機物生成とその進化（原始惑星系実験班）

1. アモルファスケイ酸塩薄膜基板作製と構造の理論的解析

原始惑星系円盤に存在する主要な固体物質基板を多様な方法で作成することが可能となった。本班のみならず、他班の実験にも基板を供給し、領域全体の研究推進に貢献している。理論的には、フォルステライト(Mg_2SiO_4)に関し、第一原理的にその表面エネルギーを求めることに成功した。従来得られていなかったラフ面の情報が得られ、スムーズ面とラフ面のエネルギーレベルの違いが明らかとなり、表面反応における役割を定量的に評価することが可能となった。

2. 原始惑星系円盤における触媒反応実験

原始惑星系円盤条件における、非晶質ケイ酸塩や金属表面における軽元素を主とする化学反応を実験的に進める方法を確立した。その結果、水素および一酸化炭素から有機物であるエタンの合成が確認できた。原始惑星系円盤条件における実験は従来世界的に全く成功してこなかったものであり、本研究の重要な成果である。

3. 結像型軟X線分光装置の開発

原始惑星系円盤における有機物形成反応のその場観察のための顕結像型顕微XANES装置の開発(図5)が順調に進み、ゾーンプレートを用いた光学系により画像を取得するに至っている。その場観察による放射光による高空間分解顕微XANESは、当分野以外にきわめて応用範囲の広い装置であり、科学・社会に対する大きな貢献となりつつある。

【研究項目A03】宇宙における分子生成と物質進化（理論班）

1. アモルファス表面構造

古典分子動力学法によりアモルファス物質の計算を行い、表面の構造およびダイナミクスを解析した。アモルファス氷では、10 K以下の極低温においても、熱振動の振幅が大きい低密度の層が存在し、極低温にもかかわらず、焼結が起こることが分かった。アモルファスフォルステライトでは、バルク状態の構造解析を行った結果、アモルファス化に伴う近距離構造の歪みを確認することができた。

2. アモルファス表面における吸着・拡散および表面反応機構

ダイレクト・アブイニシオ分子動力学法を用いて、氷表面上に吸着した水素原子の拡散を調べ、氷表面を拡散する水素原子の活性化エネルギーとして極めて小さな3.0 meVが得られた。これは、氷表面に吸着した水素原子は極低温でも、ほぼバリアレスで自由に拡散することを示唆する。また、氷表面に吸着した水ダイマーの光イオン化後のダイナミクスを調べ、ダイマーのイオン化後、10fsで隣の水分子にプロトン移動を起こし、その後反応中間体が徐々に解離し、溶媒和されたオキソニウムイオン(H_3O^+)とOHラジカルが生成することが分かった(図7)。氷表面のプロトン移動速度は気相中のほぼ倍の速さであり、氷表面が反応を加速することが明らかになった。

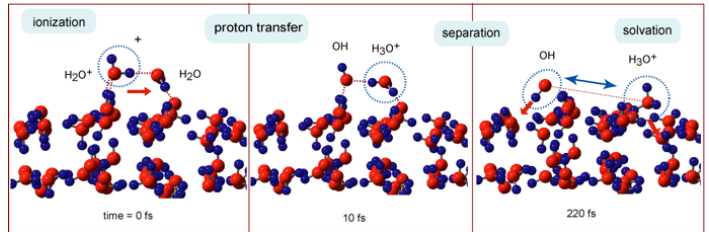


図7. 氷表面に吸着した水分子の光イオン化後のダイナミクス

3. 原始惑星系における低分子の熱変性過程

数値シミュレーションにより、氷ダストの蒸発が生じる衝撃波条件（衝撃波速度、ガス密度）を調べた。得られた結果を、観測班によって得られた結果と比較し、SO分子と同程度の吸着エネルギーを持つ固体 CO_2 分子を想定した場合、0.01 μm 以下のサイズの CO_2 は典型的な降着衝撃波により蒸発可能であることが示された。

4. 星間分子雲および原始惑星系における分子進化の過程

原始惑星系円盤中の塵表面反応を含めた化学反応計算を行い、半径数十AU程度の暖かな領域で、ラジカル同士の塵表面反応により有機分子生成が促進されることを明らかにした。また、計算結果が彗星の分子組成と良い一致を示すこと、ALMAを用いたメタノール分子輝線の観測により円盤内の塵表面反応の検証が可能であることを示した。

【研究項目A04】原始惑星系の化学的多様性とその進化（観測班）

1. 低質量原始星天体 L1527 の回転落下エンベロープにおける遠心カバリアの発見および化学組成の全貌解明

炭素鎖分子に恵まれたエンベロープを持つ原始星 L1527 (WCCC 天体)で、 $\text{c-C}_3\text{H}_2$ 、SO 分子のスペクトル線観測を ALMA で行い、分子の分布と運動を明らかにした(図3)。その結果、 $\text{c-C}_3\text{H}_2$ 分子は原始星から半径 100 AU よりも内側で消失していることがわかった。この位置は回転落下エンベロープの遠心カバリアの位置であり、そこで SO 分子がリング状に分子していることも示された。遠心カバリア付近で弱い衝撃波が発生し、ダストから蒸発したとみられる。回転落下エンベロープの遠心カバリアが捉えられたのは初めてであり、しかも、そこで劇的な化学変化が起きていることを示すことができた。その後、CS, CCH, H_2CO , CH_3OH の分布も詳細に観測し、遠心カバリアでの化学変化を定量的に示した。さらに、野辺山 45 m 鏡, IRAM 30 m 鏡を用い、スペクトル線サーベイを行った。多種多様な炭素鎖分子が豊富に存在している一方、飽和した有機分子非常に少ないことなど、この天体の化学組成の全貌を明らかにした。

2. 低質量原始星天体 IRAS15398-3359 の ALMA 観測

ALMA を用いて、WCCC 天体 IRAS 15398-3359 周りの回転落下エンベロープの化学組成の分布を調べた(図8)。この天体のエンベロープは L1527 と比べて回転成分が著しく小さく、ほぼ自由落下していることが分かった。また、原始星質量も 0.09 太陽質量以下と非常に小さく、成長途上の原始星とみられる。L1527 と

IRAS15398 はともに WCCC 天体であるので、エンベロープの化学的性質とその力学的性質

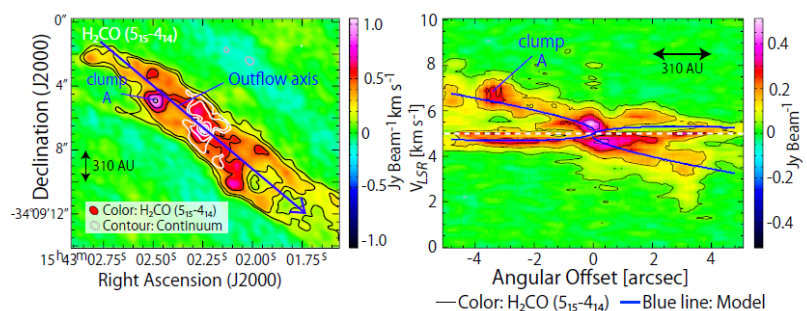


図8. WCCC 天体周りの H_2CO の分布

(比角運動量)は無関係であることを示している。従って、エンベロープの化学的性質は星形成の初期条件で決められている可能性が高い。

3. 星なしコア TMC-1 (CP)における飽和有機分子

各種電波望遠鏡 (米国立電波天文台 100 m 鏡, IRAM 30 m 鏡, 野辺山 45 m 鏡) を用いて, 原始星が生まれる前の高密度コア TMC-1(CP)で CH_3OH 分子の高速度分解能観測を行った。その結果, CH_3OH のスペクトルプロファイルは高密度ガスをトレースする C^{34}S や炭素鎖分子とは大きく異なり, 特異なダブルピーク構造をしていることを見出した。スペクトル線の解析から, CH_3OH は低密度で広がった領域に存在し, さらに, CH_3OH がダスト上で生成し, 宇宙線誘起光脱離によって気相に放出されていることが分かった。このように, スペクトル線の解析から分子の生成過程を理解する非常にユニークな手法を開発することができた。

4. 炭素鎖分子における ^{13}C 同位体種の異常

$^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ 同位体比は, 分子雲から惑星系形成領域への有機分子の進化の重要なトレーサーとなり得る。そこで, TMC-1(CP)で C_3S 分子と C_4H 分子, L1527 で $\text{c-C}_3\text{H}_2$ 分子の ^{13}C 同位体種の測定を行った。その結果, $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ 同位体比は元素比よりも著しく大きいことがわかった。即ち, ^{13}C 同位体は分子に取り込まれにくいことを示している。また, 同じ分子種でも炭素の位置によって $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ 比が大きく異なることも明らかになった。

5. テラヘルツ帯受信機カートリッジの開発

本班で製作した超伝導ホットエレクトロンボロメータ(HEB)ミキサ素子を用いて, テラヘルツ帯 (0.9-1.5 THz)の受信機カートリッジの開発を進めた。冷却遜倍器を新たに導入し, 性能向上と運用の効率化を図っている。このカートリッジの評価を行うために, 新しく冷却ジュワーを製作, 設置した。このジュワーは ASTE 10 m 電波望遠鏡に搭載されているものと同型であり, これにより搭載前試験を効率よく行うことができるようになった。

【研究項目A05】宇宙有機物の構造と同位体 (分析班)

1. 極微量宇宙有機物試料の世界最高感度の分子構造解析と同位体分析手法の開発

福岡工業大学に最新鋭の液体クロマトグラフ質量分析計 Orbitrap Q- Exactive を導入し, 立ち上げが完了した。現在, 分子雲実験班が合成した模擬星間有機化合物において CHON からなる約 100 種の同族体が検出できるところまで調整が完了した。非生物的に生成する多様なアミノ酸の LC/ESI-MS 法および LC \times GC/IRMS 法による分離同定の最適化と個別分子レベルでの炭素・窒素同位体分析法の開発を行った。また, キラルアミノ酸を分離・分析する二次元 HPLC 法も開発した。さらに, Orbitrap 質量分析計を組み合わせた二次元 HPLC-MS 分析を開発し, 重水素 D 置換体, ^{13}C 置換体, ^{15}N 置換体を区別したアミノ酸分析が可能であることが示された。同位体顕微鏡による CHON 元素の同位体分析とこれらの元素の μm オーダーの同位体マップ, 濃度比マップの分析法を確立した。

2. 同位体トレーサーを用いた星間有機物生成経路の研究

分子雲実験班との共同実験による紫外線照射実験生成物の LC/MS 分析により, 模擬星間有機化合物から多様な化合物群 (同族体も含めて CHON, CHN, CHO, CH からなる約 100 種の化合物) が検出された。紫外線照射時間や混合ガス比を変えることで生成する化合物は異なる。これらの実験生成有機物は膜状 (厚さ 数 10nm) であるが, 均質膜ではなく島状分布をしており, より高倍率ではグロービュール形態をしている。同位体顕微鏡により膜厚方向の組成分布, 原子間力顕微鏡により島状とグロービュール形態の組織観察, 透過型電子顕微鏡によりグロービュールの内部構造について研究を進めている。

3. 隕石有機物と星間有機物をリンクするマーカー分子・マーカー官能基の探査

同位体顕微鏡を用いて炭素質隕石 NWA 801 (CR2)のマトリックスを観察し, 重水素 D に濃縮した有機物をその場分析することに成功した(図 5)。これらの形状は環状, 球状, 不規則状, 集合体の 4 つのグロービュールタイプに分類でき, タイプ間の D 濃縮度に違いはなかった。この D に富む有機物は星間雲か原始太陽系外縁部で生成したと考えられる。Murchison 炭素質隕石の抽出有機化合物を LC/MS で分析して, 様々な含窒素芳香族化合物とそれらの広範なアルキル同族体を見出した(図 9)。これらの化合物は水溶液中でカンラン石存在下, アルデヒドとアンモニアを数十度で加熱した場合にも生成することを明らかにした。隕石中の岩塩結晶中に存在する水溶液の H と O の同位体比を世界で初めて分析し, 地球上の水とは全く異なる同位体比を示し, 彗星起源の水が分子進化に重要な役割を果たすことが示された。

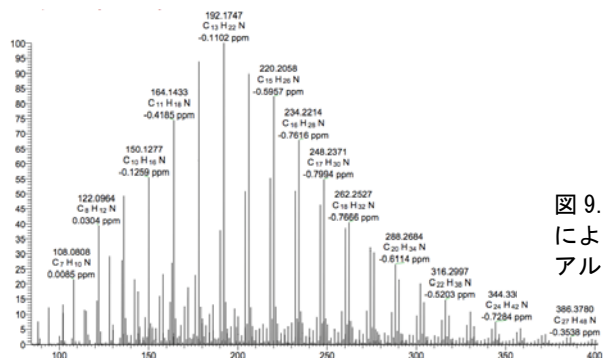


図9. 導入した液体クロマトグラフ超高分解能質量分析計により検出されたマーチソン炭素質隕石から検出されたアルキルピリジン同族体のマススペクトル

【公募研究】

公募研究では、計画研究と密接に関連した研究や計画研究ではカバーしきれない研究などが着実に進められており、すでにいくつかの興味深い研究成果があがっている。

- ・蒸着法によって Pt(111)基板上に成長させたアモルファス氷薄膜の強誘電性を調べ、アモルファス氷薄膜が強誘電的に成長することが明らかになった。(杉本敏樹)
- ・水クラスター表面で起こる光反応機構解明のために、真空紫外光イオン化検出振動分光法を開発した。(松田欣之)
- ・アルミニウムクラスター正イオン (Al_n^+) と水・酸素との反応を実験的に追跡し、水和アルミナ鉱物組成のクラスターが生成する反応経路を明らかにした。(荒川雅)
- ・木星形成後の円盤内の微惑星の軌道進化および微惑星蒸発後の凝縮の素過程を調べ、小惑星帯付近で非常に強い衝撃波が発生することが明らかになった。(田中今日子)
- ・第一原理計算により、常誘電性の氷 Ih 相と強誘電性の氷 XI 相の表面構造を明らかにし、氷表面上での水素分子の吸着状態および表面拡散特性を明らかにした。(國貞雄治)
- ・シュレーディンガー方程式の正確な解法を星間分子に適用するための方法論の開発に取り組み、 C_2H_2 , C_2H_4 , H_2CO など高精度の解を得た。(中嶋浩之)
- ・中質量星 HD100546 まわりの原始惑星系円盤の近赤外多色撮像高空間分解能観測を行い、円盤表層における水氷ダストの検出に成功した。(本田充彦)
- ・実験室分光のための帯域 240 MHz の任意波形発生器と導波管セルおよびパワーアンプを用いた分光計を開発中である。(小林かおり)
- ・隕石試料などのキラリティ直接分析手法として、マイクロビームを用いた紫外～真空紫外線領域における円二色性スペクトル計測装置の開発を行った。(田中真人)

5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5 ページ程度）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果の公表の状況（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に*印を付してください。また、一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。また、別添の「(2) 発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付してください。

【主要論文：研究項目 A01：分子雲実験班】（全て査読あり）

- *Y. Oba, N. Watanabe, Y. Osamura, Kouchi, A. (2015) Chiral glycine formation on cold interstellar grains: Origins of chiral molecules in space, **Chem. Phys. Lett.**, in press.
- *T. Hama, H. Ueta, Kouchi, A., N. Watanabe (2015) Quantum Tunneling Observed without Its Characteristic Large Kinetic Isotope Effects, **Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.**, in press.
- Hsu H. -W., Postberg F., Sekine Y., Shibuya T., Kempf S., Horányi M., Juhász A., Altobelli N., Suzuki K., Masaki Y., Kuwatani T., Tachibana S., Sirono S., Moragas-Klostermeyer, G. Srama R. (2015) Ongoing hydrothermal activities within Enceladus. **Nature**, 519, 207-210.
- Simakov S.K., Kouchi, A., Melnik N.N., Scribano V., Kimura Y., Hama T., Suzuki N., Saito H., Yoshizawa T. (2015) Nanodiamond finding in the Hyblean shallow mantle xenoliths, **Sci. Rep.**, 5,10765.
- ◎Tachibana S., Abe M., Arakawa M., Fujimoto M., Iijima Y., Ishiguro M., K. Kitazato, Kobayashi N., Namiki N., Okada T., Okazaki R., Sawada H., Sugita S., Takano Y., Tanaka S., Watanabe S., Yoshikawa M., Kuninaka H., Hayabusa2 Project Team (2014) Hayabusa2: Scientific importance of samples returned from C-type near-Earth asteroid (162173) 1999 JU₃, **Geochem. J.**, 48,571-587.
- Terada K., Ninomiya K., Osawa T., Tachibana S., Miyake Y., Kubo M. K., Kawamura N., Higemoto W., Tsuchiyama A., Ebihara M., Uesugi M. (2014) A new X-ray fluorescence spectroscopy for extraterrestrial materials using a muon beam, **Sci. Rep.**, 4, 05072.
- *T. Hama, H. Ueta, Kouchi, A., N. Watanabe, H. Tachikawa (2014) Quantum Tunneling Hydrogenation of Solid Benzene and Its Control via Surface Structure, **J. Phys. Chem. Lett.**, 5, 3843-3848.
- *Y. Oba, K. Osaka, N. Watanabe, T. Chigai, Kouchi, A. (2014) Reaction kinetics and isotope effect of water formation by the surface reaction of solid H₂O₂ with H atoms at low temperatures, **Faraday Discussions**, 168,185.
- *Y. Oba, T. Chigai, Y. Osamura, N. Watanabe, Kouchi, A. (2014) Hydrogen Isotopic Substitution of Solid Methylamine through Atomic Surface Reactions at Low Temperatures: A Potential Contribution to the D/H Ratio of Methylamine in Molecular Clouds, **Meteorit. Planet. Sci.**, 49, 117-132.
- ◎T. Hidemori, T. Nakayama, Y. Matsumi, T. Kinugawa, A. Yabushita, M. Ohashi, T. Miyoshi, S. Irei, A. Takami, N. Kaneyasu, A. Yoshino, R. Suzuki, Y. Yumoto, S. Hatakeyama (2014) Characteristics of atmospheric aerosols containing heavy metals measured on Fukue Island, Japan, **Atmos. Environ.**, 97, 447-455.
- P. D. Hamer, D. E. Shallcross, A. Yabushita, M. Kawasaki, V. Marécal, C. S. Boxe (2014) Investigating the photo-oxidative and heterogeneous chemical production of HCHO in the snowpack at the South Pole, Antarctica, **Environ. Chem.**, 11, 459-471.
- M. Araki, K. Niwayama, K. Tsukiyama (2014) Laboratory Optical Spectroscopy of Thiophenoxy Radical and Its Profile Simulation as a Diffuse Interstellar Band Based on Rotational Distribution by Radiation and Collisions, **Astron. J.**, 148, 87.
- M. Araki, K. Abe, H. Furukawa, K. Tsukiyama (2014) Far-infrared amplified emission from the $v = 1$ autoionizing Rydberg states of NO, **Chem. Phys. Lett.**, 601, 181-185.
- T. Hama, *N. Watanabe (2013) Surface Processes on Interstellar Amorphous Solid Water: Adsorption, Diffusion, Tunneling Reactions, and Nuclear-Spin Conversion, **Chem. Rev.**, 113 (12), pp 8783-8839.
- N. Watanabe, T. Hama, Kouchi, A. (2013) Nuclear spin temperatures of hydrogen and water molecules on amorphous solid water, **AIP Conf. Proc.**, 1543, 308-316.
- Takigawa A., Tachibana S., Huss G. R., Nagashima K., Makide K., Krot A. N., Nagahara, H. (2013) Morphology and crystal structures of solar and presolar Al₂O₃ in unequilibrated ordinary chondrites, **Geochim. Cosmochim. Acta**. 124, 309-327.
- A. Yabushita, T. Hama, M. Kawasaki (2013) Photochemical reaction processes during vacuum-ultraviolet irradiation of water ice, **J. Photochem. Photobiol. C**, 16, 46-61.

【主要論文：研究項目 A02：原始惑星系実験班】（全て査読あり）

- Takigawa, A., Tachibana, S., Nagahara, H., Ozawa, K. (2015) Evaporation and condensation kinetics of corundum: the origin of the 13- μm feature of oxygen-rich AGB stars, **Astrophys. J.**, 218,2.
- O. Takahashi, M. Kimoto, L. G. M. Pettersson (2015) Theoretical study of the X-ray natural circular dichroism of some amino acids in crystal, **Chem. Phys.**, 450-451,109-114.
- Ito, Y., Ikoma, M., Kawahara, H., Nagahara, H., Kawashima, Y., Nakamoto, T. (2015) Theoretical emission spectra of atmospheres of hot rocky super-earths. **Astrophys. J.**, 801, 144.
- K. Takashima, M. Hoshino, K. Uesugi, N. Yagi, S. Matsuda, A. Nakahira, N. Osumi, M. Kohzuki, H. Onodera (2015) X-ray phase-contrast computed tomography visualizes the microstructure and degradation profile of implanted biodegradable scaffolds after spinal cord injury, **J. Synchrotron Rad.**, 22, 136-142.
- Sakai, R., Nagahara, H., Ozawa, K., Tachibana, S. (2014) Composition of the lunar magma ocean constrained by the conditions for the crust formation. **Icarus**, 299, 45-56.
- Imada, S., Ohta, K., Yagi, T., Hirose, K., Yoshida, H., Nagahara, H. (2014) Measurements of lattice thermal conductivity of MgO to core-mantle boundary pressures. **Geophys. Res. Lett.**, 41, 4542-4547.
- T. Yoshimura, Y. Tamenori, H. Kawahata, A. Suzuki, Fluctuations of sulfate, S-bearing amino acids and magnesium in a giant clam shell, **Biogeosci.**, 111, 1613-1629, (2014)
- N. Nishiyama, F. Wakai, H. Ohfuji, Y. Tamenori, H. Murata, T. Taniguchi, M. Matsushita, M. Takahashi, E. Kulik, K. Yoshida, K. Wada, J. Bednarcik, T. Irifune, (2014) Fracture-induced amorphization of polycrystalline SiO₂ stishovite: a potential platform for toughening in ceramics, **Sci. Rep.**, 4, 6558.
- T. Gejo, T. Ikegami, K. Honma, O. Takahashi, E. Shigemasa, Y. Hikosaka, Y. Tamenori (2014) Dynamics of oxygen Rydberg atom generation following O 1s inner-shell excitation of H₂O, **J. Chem. Phys.**, 140, 214310(7 pages)
- O. Takahashi, K. Ueda (2014) Molecular double core-hole spectroscopy for probing chemical bonds: C₆₀ and chain molecules revisited, **Chem. Phys.**, 440, 64-68.
- A. Tsuchiyama, M. Uesugi, K. Uesugi, Nagano, Y. Imai, A. Shimada, A. Takeuchi, Y. Suzuki, T. Nakamura, T. Noguchi, M. Abe, T. Yada, A. Fujimura (2014) Three-dimensional microstructure of samples recovered from asteroid 25143 Itokawa: comparison with LL5 and LL6 chondrite particles. **Meteorit. Planet. Sci.**, 49, 172-187.
- R. Nomura, K. Hirose, K. Uesugi, Y. Ohishi, A. Tsuchiyama, A. Miyake, Y. Ueno (2014) Low Core-Mantle Boundary Temperature Inferred from the Solidus of Pyrolite, **Science**, 343, 522-525.
- J. Matsuno, A. Tsuchiyama, A. Miyake, R. Noguchi, S. Ichikawa (2014) Reduction Experiment of FeO-Bearing Amorphous Silicate: Application to Origin of Metallic Iron in GEMS, **Astrophys. J.**, 792, 136-
- Y. Kimura, H. Niinomi, K. Tsukamoto, J., M. García-Ruiz (2014) In Situ Live Observation of Nucleation and Dissolution of Sodium Chlorate Nanoparticles by Transmission Electron Microscopy, **J. Am. Chem. Soc.**, 136, 1762-1765.
- *H. Niinomi, H. Miura, Y. Kimura, M. Uwaha, H. Katsuno, S. Harada, T. Ujihara, K. Tsukamoto, (2014) Emergence and Amplification of Chirality via Achiral-Chiral Polymorphic Transformation in Sodium Chlorate Solution Growth, **Cryst. Growth Design**, 14, 3596-3602.
- M. Hoshino, K. Uesugi, T. Tsukube, N. Yagi (2014) Quantitative and dynamic measurements of biological fresh samples with X-ray phase contrast tomography, **J. Synchrotron Rad.**, 21, 1347-1357.
- Tachibana, S., Tamada, S., Kawasaki, H., Ozawa, K., Nagahara, H. (2013) Interdiffusion of Mg-Fe in olivine at 1400-1600 °C and 1 atm total pressure. **Phys. Chem. Mineral.**, 40, 511-519.
- Tenner, T. J., Ushikubo, T., Kurahashi, E., Nagahara, H., Kita, N. T. (2013) Oxygen isotope systematics of chondrule phenocrysts from the CO3.0 chondrite Yamato 81020: Evidence for two distinct oxygen isotope reservoirs. **Geochim. Cosmochim. Acta**, 102, 226-245.
- Kimura Y., Sato T., Nakamura N., Nozawa J., Nakamura T., Tsukamoto K., Yamamoto K. (2013) Vortex magnetic structure in framboidal magnetite reveals existence of water droplets in an ancient asteroid. **Nature Comm.**, 4, 2649.

【主要論文：研究項目 A03：理論班】（全て査読あり）

- H. Tachikawa, T. Takada (2015) Proton transfer rates in ionized water clusters (H₂O)_n (n = 2–4), **RSC Adv.**, 5, 6945-6953.
- *K. I. Öberg, V. V. Guzmán, K. Furuya, C. Qi, Y. Aikawa, S. M. Andrews, R. Loomis, D. J. Wilner (2015) The comet-like composition of a protoplanetary disk as revealed by complex cyanides, **Nature**, 520, 198–201.
- Aota, T., Inoue, T., Aikawa, Y. (2015) Evaporation of Grain-surface Species by Shock Waves in a Protoplanetary Disk, **Astrophys. J.**, 799, 141(9pp).
- Y. Sekine, H. Takagi, S. Sudo, Y. Kajiwara, H. Fukazawa, *T. Ikeda-Fukazawa (2014) Dependence of structure

of polymer side chain on water structure in hydrogels, **Polymer**, 55, 6320-6324.

- Y. Sekine, T. Ikeda-Fukazawa, M. Aizawa, R. Kobayashi, S. Chi, J. A. Fernandez-Baca, H. Yamauchi, *H. Fukazawa (2014) Neutron Diffraction of Ice in Hydrogels, **J. Phys. Chem.**, B 118, 13453-13457.
- K. Kudo, J. Ishida, G. Syuu, Y. Sekine, *T. Ikeda-Fukazawa (2014) Structural changes of water in poly(vinyl alcohol) hydrogel during dehydration, **J. Chem. Phys.**, 140, 044909 (8-pages).
- Y. Sekine, K. Okazaki, T. Ikeda-Fukazawa, M. Ichikawa, K. Yoshikawa, S. Mukai, *K. Akiyoshi (2014) Microrheology of polysaccharide nano gel-integrated system, **Colloid Poly. Sci.**, 292, 325-331.
- H. Tachikawa (2014) Water-Accelerated OH Addition to Sulfur Dioxide SO₂: Direct Ab Initio Molecular Dynamics, **J. Phys. Chem.**, A 118, 3230-3236.
- H. Tachikawa, T. Iyama, H. Kawabata (2014) Effect of hydrogenation on the band gap of graphene nano-flakes, **Thin Solid Films**, 554, 199-203.
- H. Tachikawa, T. Iyama (2014) Electronic structures and large spectrum shifts in hydrogenated fullerenes: Density functional theory study, **Thin Solid Films**, 554, 148-153.
- H. Miura, T. Yamamoto (2014) A New Estimate of Chondrule Cooling Rate Deduced from an Analysis of Compositional Zoning of Relict Olivine, **Astron. J.**, 147, 54 (9-pages).
- Furuya, K., Aikawa, Y. (2014) Reprocessing of Ices in Turbulent Protoplanetary Disks: Carbon and Nitrogen Chemistry, **Astrophys. J.**, 790, 97.
- Walsh, C., Herbst, E., Nomura, H., Millar, T.J., Widicus Weaver, S. (2014) Complex organic molecules along the accretion flow in isolated and externally irradiated protoplanetary disks, **Faraday Discussions**, 168, 389-421.
- *T. Ikeda-Fukazawa, N. Ikeda, M. Tabata, M. Hattori, M. Aizawa, S. Yunoki, Y. Sekine (2013) Effects of Crosslinker Density on the Polymer Network Structure in Poly-N,N-dimethylacrylamide Hydrogels, **J. Poly. Sci.**, Part B, 51, 1017-1027.
- H. Tachikawa, T. Takada(2013) Ionization dynamics of the water trimer: A direct ab initio MD study, **Chem. Phys.**, 415, 76-83.
- H. Tachikawa, T. Iyama, H. Kawabata (2013) Interaction of Hydroxyl OH Radical with Graphene Surface: A Density Functional Theory Study, **Jpn. J. Appl. Phys.**, 52, 01AH01.
- H. Miura, K. Tsukamoto (2013) Role of impurity on growth hysteresis and oscillatory growth of crystals, **Cryst. Growth Design**, 13, 3588-3595.
- Aikawa, Y. (2013) Interplay of Chemistry and Dynamics in the Low-Mass Star Formation, **Chem. Rev.**, 113, 8961-8980.
- Furuya, K., Aikawa, Y., Nomura, H., Hersant, F., Wakelam, V. (2013) Water in Protoplanetary Disks: Deuteration and Turbulent Mixing, **Astrophys. J.**, 779, 11.

【主要論文：研究項目 A04：観測班】（全て査読あり）

- Shiino, T., Furuya, R., Soma, T., Watanabe, Y., Sakai, T., Jiang, L., Maezawa, H., Yamakura, T., Sakai, N., Yamamoto, S. (2015) Low Noise 1.5 THz Waveguide-Type Hot-Electron Bolometer Mixers Using a Relatively Thick NbTiN Superconducting Film, **Jpn. J. Appl. Phys.**, 54,033101.
- Soma, T., Sakai, N., Watanabe, Y., Yamamoto, S. (2015) Methanol in the Starless Core, Taurus Molecular Cloud-1, **Astrophys. J.**, 802,74.
- Sakai, T., Sakai, N., Foster, J.B., Sanhueza, P., Jackson, J.M., Kassis, M., Furuya, K., Aikawa, Y., Hirota, T., Yamamoto, S. (2015) ALMA Observations of the IRDC Clump G34.43+00.24 MM3: DNC/HNC Ratio, **Astrophys. J.**, 803,70.
- Sakai, N., Sakai, T., Hirota, T., Watanabe, Y., Ceccarelli, C., Kahane, C., Bottinelli, S., Caux, E., Demyk, K., Vastel, C., Coutens, A., Taquet, V., Ohashi, N., Takakuwa, S., Yen, H.-W., Aikawa, Y., Yamamoto, S. (2014) Change in the Chemical Composition of Infalling Gas Forming a Disk around a Protostar, **Nature**, 507, 78.
- Sakai, N., Oya, Y., Sakai, T., Watanabe, Y., Hirota, T., Ceccarelli, C., Kahane, C., Lopez-Sepulcre, A., Bertrand, L., Vastel, C., Bottinelli, S., Caux, E., Coutens, A., Aikawa, Y., Takakuwa, S., Ohashi, N., Yen, H.-W., Yamamoto, S. (2014) Chemical View of Protostellar–Disk Formation in L1527, **Astrophys. J.**, 791, L38.
- Oya, Y., Sakai, N., Sakai, T., Watanabe, Y., Hirota, T., Lindberg, J.E., Bisschop, S.E., Joergensen, J.K., van Dishoeck, E.F., Yamamoto, S. (2014) A Substellar-Mass Protostar and Its Outflow of IRAS 15398-3359 Revealed by Subarcsecond-Resolution Observations of H₂CO and C₂H, **Astrophys. J.**, 795, 192.
- Yanagida, T., Sakai, T., Sakai, N., Foster, J.B., Sanhueza, P., Jackson, J.M., Kassis, M., Furuya, K., Aikawa, Y., Hirota, T., Yamamoto, S. (2014) ALMA Observations of the IRDC Clump G34.43+00.24 MM3: 278 GHz Class I Methanol Masers, **Astrophys. J.**, 794, L10.
- ©Gonzalez, A., Soma, T., Shiino, T., Kaneko, K., Uzawa, Y., Yamamoto, S. (2014) Optics Characterization of a 900 GHz HEB Receiver for the ASTE Telescope: Design, Measurement, and Tolerance Analysis, **J. Infrared**

Milli. Terahz. Waves, 35, 743.

- 山本智(2014) 動き始めた ALMA 望遠鏡：星間化学の新時代の幕開け, **Mol. Sci.**, 8, A0072.
- Sakai, N., Takano, S., Sakai, T., Shiba, S., Sumiyoshi, Y., Endo, Y., Yamamoto, S. (2013) Anomalous ¹³C Isotope Abundances in C₃S and C₄H Observed toward the Cold Interstellar Cloud, Taurus Molecular Cloud-1, **J. Phys. Chem.**, 117, 9831.
- Sakai, T., Sakai, N., Foster, J.B., Sanhueza, P., Jackson, J.M., Kassis, M., Furuya, K., Aikawa, Y., Hirota, T., Yamamoto, S. (2013) ALMA Observations of the IRDC Clump G34.43+00.24 MM3: Hot Core and Molecular Outflows, **Astrophys. J.**, 775, L31.
- Sakai, N., Yamamoto, S. (2013) Warm Carbon-Chain Chemistry, **Chem. Rev.**, 113, 8981.

【主要論文：研究項目 A05：分析班】（全て査読あり）

- *Naraoka, H., Aoki, D., Fukushima, K., Uesugi, M., Ito, M., Kitajima, F., Mita, H., Yabuta, H., Takano, Y., Yada, T., Ishibashi, Y., Karouji, Y., Okada, T., Abe, M. (2015) ToF-SIMS analysis of carbonaceous particles in the sample catcher of the Hayabusa spacecraft, **Earth Planet. Space**, 67,67.
- Kitajima, F., Uesugi, M., Karouji, Y., Ishibashi, Y., Yada, T., Naraoka, H., Abe, M., Fujimura, A., Ito, M., Yabuta, H., Mita, H., Takano, Y., Okada, T. (2015) A micro-Raman and infrared study of the several Hayabusa category 3 (organic) particles, **Earth, Planet. Space**, 67,20.
- Takano, Y., Chikaraishi, Y., Ohkouchi, N. (2015) Isolation of underivatized amino acids by ion-pair high performance liquid chromatography for precise measurement of nitrogen isotopic composition of amino acids: development of comprehensive LCxGC/C/IRMS method, **Int. J. Mass Spectr.**, 379, 16-25.
- Wakita, S., Nakamura, T., Ikeda, T., Yurimoto, H. (2014) Thermal modeling for a parent body of Itokawa, **Meteorit. Planet. Sci.**, 49, 228-236.
- Zhang, A.-C., Itoh, S., Sakamoto, N., Wang, R.-C., Yurimoto, H. (2014) Origins of Al-rich chondrules: Clues from a compound Al-rich chondrule in the Dar al Gani 978 carbonaceous chondrite, **Geochim. Cosmochim. Acta**, 130, 78–92.
- Yurimoto, H., Itoh, S., Zolensky, M., Kusakabe, M., Karen, A., Bodnar, R. (2014) Isotopic compositions of asteroidal liquid water trapped in fluid inclusions of chondrites, **Geochem. J.**, 48, 549-560.
- Yamashita, Y., Naraoka, H. (2014) Two homologous series of alkylpyridines in the Murchison meteorite, **Geochem. J.**, 48, 519-525.
- ©Hamase, K., Nakauchi, Y., Miyoshi, K., Koga, R., Kusano, N., Onigahara, H., Naraoka, H., Mita, H., Kadota, Y., Nishio, T., Mita, M., Lindner, W. (2014) Enantioselective Determination of Extraterrestrial Amino Acids Using a Two-Dimensional Chiral High-Performance Liquid Chromatographic System, **Chromatography**. 35, 103-110.
- Ito, M., Uesugi, M., Naraoka, H., Yabuta, H., Kitajima, F., Mita, H., Takano, Y., Karouji, Y., Yada, T., Ishibashi, Y. (2014) H, C, and N isotopic compositions of Hayabusa category 3 organic samples, **Earth, Planet. Space**, 66,91.
- Yabuta, H., Uesugi, M., Naraoka, H., Ito, M., Kilcoyne, A.L.D., Sandford, S.A., Kitajima, F., Mita, H., Takano, Y., Yada, T., Karouji, Y., Ishibashi, Y., Okada, T., Abe, M. (2014) Molecular compositions of Hayabusa Category 3 carbonaceous particles, **Earth, Planet. Space**, 66,156.
- Kawaguchi, Y., Sugino, T., Tabata, M., Okudaira, K., Imai, E., Yano, H., Hasegawa, S., Hashimoto, H., Yabuta, H., Kobayashi, K., Kawai, H., Mita, H., Yokobori, S., Yamagishi, A. (2014) Fluorescence imaging of microbe-containing micro-particles shot from a two-stage light-gas gun into an ultra-low density silica aerogel, **Origin Life Evol. Bios.**, 44, 43-60 .
- Wakaki, S., Itoh, S., Tanaka, T., Yurimoto, H. (2013) Petrology, trace element abundances and oxygen isotopic compositions of a compound CAI-chondrule object from Allende. **Geochim. Cosmochim. Acta**, 102, 261-279.
- Ebata, S., Ishihara, M., Kumondai, K., Mibuka, R., Uchino, K., Yurimoto, H. (2013) Development of an ultra-high performance multi-turn TOF-SIMS/SNMS System “MULTUM-SIMS/SNMS”, **J. Am. Soc. Mass Spectrom.**, 24, 222-229.
- Hashiguchi, M., Kobayashi, S., Yurimoto, H. (2013) In situ observation of D-rich carbonaceous globules embedded in NWA 801 CR2 chondrite, **Geochim. Cosmochim. Acta**, 122, 306-323.
- Zhang, A.-C., Yurimoto, H. (2013) Petrography and mineralogy of the ungrouped type 3 carbonaceous chondrite Dar al Gani 978, **Meteorit. Planet. Sci.**, 48, 1651–1677.
- Paque, J. M., Sutton, S. R., Simon, S. B., Beckett, J. R., Burnett, D. S., Grossman, L., Yurimoto, H., Itoh, S., Connolly, H. C. (2013) XANES and Mg isotopic analyses of spinels in Ca-Al-rich inclusions: Evidence for formation under oxidizing conditions, **Meteorit. Planet. Sci.**, 48, 2015-2043.

【主要論文：公募研究】（全て査読あり）

- M. Arakawa, K. Kohara, A. Terasaki (2015) Reaction of aluminum cluster cations with a mixture of O₂ and H₂O Gases: Formation of Hydrated-Alumina Clusters, **J. Phys. Chem., C**, 119, 10981-10986.
- T. Murakami, A. Ohta, T. Suzuki, K. Ikeda, S.O. Danielache, S. Nanbu (2015) Theoretical study of ultraviolet induced photodissociation dynamics of sulfuric acid, **Chem. Phys.**, 452, 17-24.
- H. Nakatsuji, H. Nakashima (2015) Free-complement local-Schrödinger-equation method for solving the Schrödinger equation of atoms and molecules. Basic theories and features, **J. Chem. Phys.**, 142, 084117.
- *H. S.P. Müller, *K. Kobayashi, K. Takahashi, K. Tomaru, F. Matsushima (2015) Terahertz spectroscopy of N¹⁸O and isotopic invariant fit of several nitric oxide isotopologs, **J. Molecul. Spectro.**, 310, 92-98.
- T. Sugimoto, K. Fukutani (2014) Effects of Rotational-Symmetry Breaking on Physisorption of Ortho- and Para-H₂ on Noble Metal Surface, **Phys. Rev. Lett.**, 112, 146101.
- K. Nakagawa, H. Harper-Lovelady, Y. Tanaka, M. Tanaka, M. Yamato, T. Asahi (2014) A high-accuracy universal polarimeter study of optical anisotropy and optical activity in laminated collagen membranes, **Chem. Comm.**, 50, 15086-15089.
- K. K. Tanaka, J. Diemand, R. Angéilil, H. Tanaka (2014) Free energy of cluster formation and a new scaling relation for the nucleation rate, **J. Chem. Phys.**, 140, 194310.
- Y. Kunisada, N. Sakaguchi (2014) Two-Dimensional Quantum Dynamics of O₂ Dissociative Adsorption on Ag(111), **RSC Adv.**, 4, 63508-63512.

【ホームページ】

和英双方のウェブページ (<http://www.astromolecules.org>) を制作し、当研究領域の研究成果、公募情報、研究集会やワークショップの案内、その他トピックス等を随時掲載し、これらの情報を迅速に広く周知するように努めている。

【一般向けアウトリーチ】

啓蒙書

- 橋 省吾 (2014) "太陽系の元素は銀河系から" 宇宙と生命の起源 2 ～素粒子から細胞へ (岩波ジュニア新書) (小久保英一郎・嶺重慎編), 岩波書店, pp.256
- 橋 省吾 (2014) Newton 太陽系 誕生と進化 (執筆協力)

メディア、一般講演会等

香内 晃, 羽馬 哲也

- 北海道大学低温科学研究所一般公開 「実験室で彗星を作ってみよう」 2014.6.7

橋 省吾

- NHK コズミック フロント 「はやぶさ 2 知恵と夢の結晶」 2015.2.19
- 北海道新聞 「はやぶさ 2 生命の起源に迫りたい」 2014.12.5
- NHK クローズアップ現代 「はやぶさ 2 “生命の起源” 探る旅へ」 2014.11.27
- 共同通信 「はやぶさ 2, 30 日打ち上げ 地球誕生プロセスの解明期待」 2014.11.24
- BS フジ ガリレオ X 「ついに本番! はやぶさ 2 太陽系と生命の歴史を知る旅へ」 2014.6.22
- いわて銀河フェスタ 2014 「はやぶさ 2—太陽系大航海時代に見る夢」 2014.8.30

坂本尚義

- なよろ市立天文台市民講演会 「ここまでわかった『はやぶさ』による科学～さあ行くぞ『はやぶさ 2』」 2014.7.18
- NHK スペシャル 「遭遇! 巨大彗星アイソン」 2013.12.4 OA

奈良岡浩

- NHK コズミックフロント 「密着! 隕石ハンター」 2014.3.27 OA
- 「はやぶさ 2」打ち上げ・パブリックビューイング講演 「はやぶさ 2 の有機物科学」九州大学 2014.11.30

三田 肇

- 国公立大コンソーシアム・福岡出前講義 「地球外生命体を求めて! ～アストロバイオロジー研究の最先端～」 城東高校 2014.1.10
- Origins2014 国際会議公開講演会 「地球上で生命はどのように生まれたか? —有機物の進化から—」 奈良女子大学 2014.7.11

高野識淑

- 宇宙航空研究開発機構 特別公開イベント 「生命圏と非生命圏の境界における分子の科学」 JAXA 相模原キャンパス 2014.7.26.

6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2ページ程度）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、研究組織間の連携状況について組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

計画研究と研究項目の関係

本研究領域の目的は、分子雲から原始惑星系に至る分子進化を、多様なしかも最先端の方法で理解することである。このため、研究手法の異なる研究チームを組織することが最も効率的に研究を推進する方法であると考え、以下のように5つの研究項目を設ける。それぞれが5件の計画研究と1対1に対応している。

- ・研究項目A01：分子雲における氷・有機物生成（分子雲実験班）
- ・研究項目A02：原始惑星系における有機物生成とその進化（原始惑星系実験班）
- ・研究項目A03：宇宙における分子生成と物質進化（理論班）
- ・研究項目A04：原始惑星系の化学的多様性とその進化（観測班）
- ・研究項目A05：宇宙有機物の構造と同位体（分析班）

また、これらの研究計画および公募研究間での相互協力のもと**高度に統合**して機能するよう、企画調整・評価助言を担う総括班を設ける。

- ・X00：宇宙における分子進化：星間雲から原始惑星系へ（総括班）

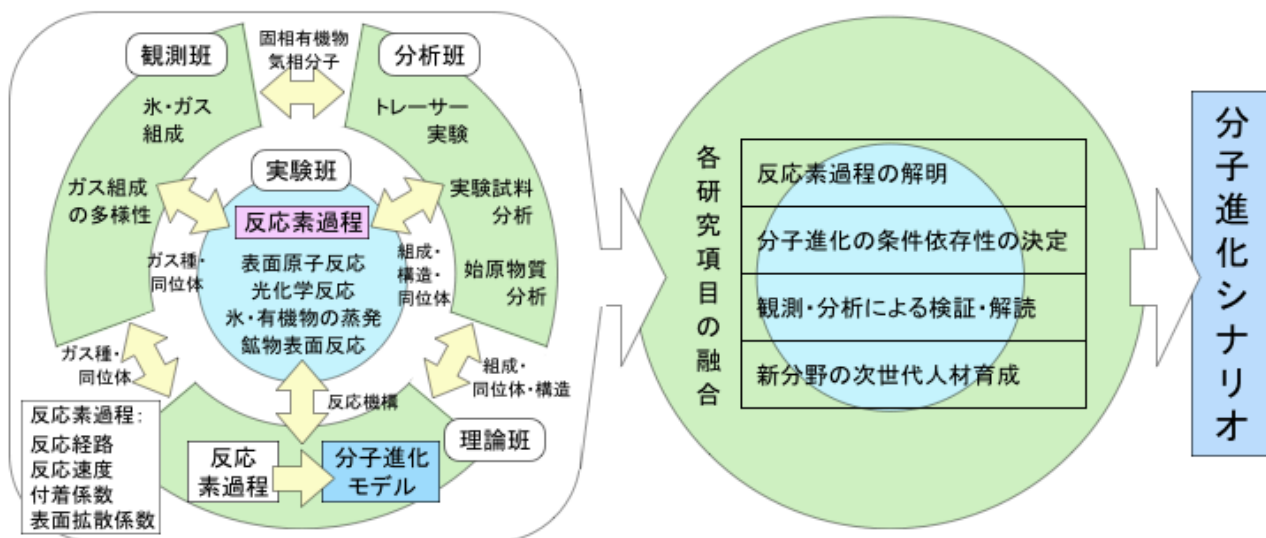


図 10. 計画研究間での連携による分子進化シナリオの構築体制

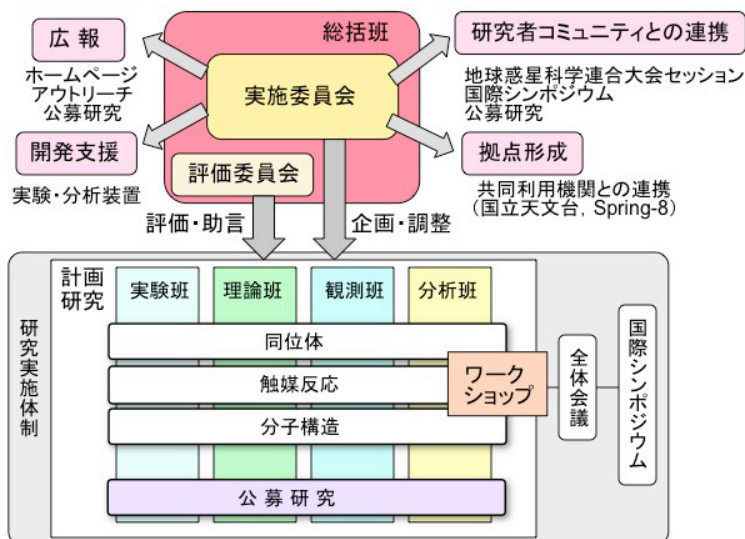


図 11. 総括班の役割とワークショップ

研究組織間の連携状況

本研究領域では、計画研究間の交流を促し、実験、理論、観測、分析という手法の枠を超え、垣根を取り払うことによって新たな研究を生み出す事が重要である。具体的には、分子進化のシナリオの作成に必須な項目について、各班同士が迅速に情報を共有し、相互理解・議論を深め、共同研究を大幅に高速化させ、相乗効果を生むように最大限の努力をしている。

図 12 に計画研究間で現在進行中の連携研究課題を示す。当初の想定以上に幅広い課題で連携研究が進展している。総括班メンバー間の密接な連絡や、年に数回開催される総括班会議を通して連携研究の推進を図っている。計画

研究の分担者や公募研究を含む領域全体の研究や連携に関しては、年 1 回開催される全体集会で、研究成果をできる限り多くのメンバーと共有しさらに新たな展開に結びつかせるよう努めている。

さらに、共通性の高い研究課題に関しては、各計画研究の枠を超えた「ワークショップ」を研究の進展に応じて随時開催し、より深い議論が進むよう工夫をして、最大限の有機的連携を図るように努めている。これまでに、計 7 回のワークショップを若手研究者が企画して開催した（詳細は「3. 審査の所見において指摘を受けた事項への対応状況」参照）。

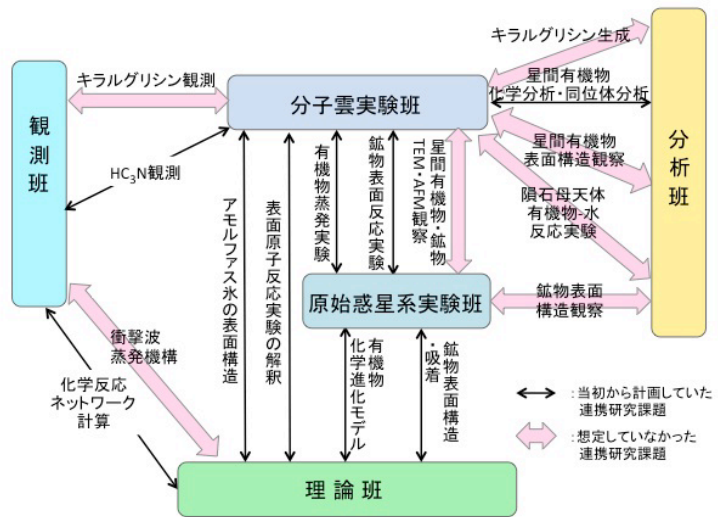


図 12. 計画研究間の現在の連携状況

研究項目と公募研究の関係

本研究領域では、平成 26, 27 年度の 2 年間で行う公募研究として、15 件の研究課題を採択した（本報告書 2~4 ページの研究組織参照）。これらの公募研究では、計画研究と有機的に結びつき新たな研究の創造が期待できる課題、計画研究がカバーしていない重要な課題およびその他独創的・萌芽的な課題、が採択されている。なお、計画研究との関連に関しては、図に代表者の名前を入れて当該課題の位置づけを示した。

多額の研究経費が必要な実験的・観測的研究課題には最大 600 万円/年、その他の研究課題には最大 200 万円/年の研究経費を配分して、若手研究者が独立して研究を遂行するために配慮している。

公募研究と計画研究間の連携も想定以上に活発におこなわれており、上記の計画研究間の連携研究への参加、ワークショップを通じた複数の計画研究と連携研究への発展など、成果をあげつつある。

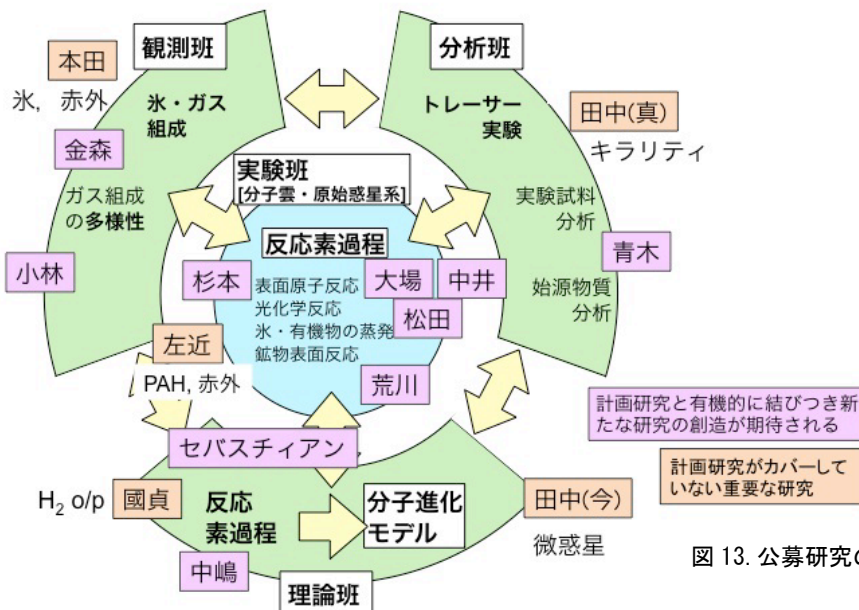


図 13. 公募研究の位置付け

7. 若手研究者の育成に係る取組状況（1 ページ程度）

領域内の若手研究者の育成に係る取組状況について記述してください。

各班で若手研究者の雇用や大学院生の支援を積極的に行うよう促すとともに、ワークショップ等を通じて総括班からの支援もおこなっている。

国際的な視野を持つ研究者育成

領域全体で、博士研究員5名を雇用し、以下の研究に参画させ研究体制を強化させるとともに、若手研究者育成の柱としている。ダイレクト・アブイニシオ分子動力学法による表面反応の研究（北大）、電波望遠鏡による観測研究（東大）、有機物の形態観察・同位体分析（北大）、有機物の構造分析（九大）、アミノ酸分析（JAMSTEC）。うち2名（有機物の形態観察・同位体分析（北大）、電波望遠鏡による観測研究（東大））は外国人であり、研究のみならず、彼女たちの出身の研究グループとの連携を強化するのに大きな役割を果たしている。特に、前者の博士研究員は、わずか2年の間に優れた研究成果をあげ、それが高く評価され北大の講師として採用されたことは、特筆に値する。

また、大学院生の積極的な研究への参加と研究交流も推奨している。具体例として、九州大学の大学院生が北海道大学に1ヶ月ほど滞在し、氷の光化学反応実験技術を習得した。IRAM 30 m電波望遠鏡による低質量原始星の化学組成サーベイ観測に東京大学の2名の大学院生を派遣（10日間）した。また、フランスの修士課程の大学院生を半年間受け入れ、光化学反応実験および四重極型質量分析計のデータ解析を通じ、フランスの大学院教育に協力するとともに、次世代研究者の育成とも位置づけている。大学院生の交流および研究討論のために、国内外の学会やシンポジウム出席のための旅費等も支給している。さらに、研究集会やワークショップには、計画研究や公募研究の分担者が所属する研究室以外にも広く呼びかけ、旅費を支給した。

若手研究者の自主性を尊重したワークショップの開催

計画研究を縦糸とすると、ワークショップは各班の研究に共通する横糸であるとみなせる（「6. 研究組織と各研究項目の連携状況」参照）。ワークショップのテーマ選定にあたっては、若手研究者が自主的に企画し、主体的に参加することを最も重視した。また、分野の異なる研究者が集まる新学術領域において共通語を育み、さらに、若手研究者に広い視野を持たせるという意味でも重要な企画である。最初の2年間で6回のワークショップを開催した。事実、ワークショップにおける徹底した議論から、当初の想定をはるかに超えた多様で新しい連携研究が始まるとともに、興味ある成果も度々あり、ワークショップの企画は成功したと考えている。

公募研究に際しての若手重視

公募研究では、学会や研究会で事前に周知し、若手研究者からの応募を促すとともに、採択にあっても特に研究課題の将来性を考慮した。その結果、若手研究者からの独創的かつ多様な研究計画が多数申請された。15件の採択課題のうち、11件が30歳代以下の若手研究者であった。若手研究者が独立して研究を推進できるように配慮し、多額の研究経費が必要な実験的・観測的研究課題には最大600万円/年、その他の研究課題には最大200万円/年の研究経費を配分した。計画研究が5年間で系統的な成果を確実に挙げることを目標にしているのに対し、公募研究では、計画研究がカバーしていない分野や萌芽的な課題も採択した。

若手技術者育成

新学術領域のような新たな研究領域を生み出す研究においては、研究者だけで研究を遂行できるものではなく、技術者の支援は不可欠であり、若手技術者の育成も重要な課題であると認識している。このような考えのもと、北大低温研の若手技術職員2名をチリのASTE望遠鏡に派遣し、彼らが開発した観測機器の搭載作業を行わせた。機器の開発を日本にいて行うだけの状況と比較して、実際に現地に赴いて搭載作業を行うことは、望遠鏡全体をシステムとして理解することに繋がり、非常に大きな利点があるだけでなく、今後の機器開発においても大きな糧となった。さらに、2名の若手技術支援職員を雇用し（光化学反応実験：北大、精密質量分析のデータ解析：福岡工大）、更なる人材育成にも努めている。

若手研究者育成の成果

本領域開始後の2年間に、若手の分担者、連携研究者、公募研究者が、以下に示すように昇進した。もちろんこれまでの研究成果等も評価されていることは間違いないが、本領域における研究成果も高く評価されてのことだと考えている。特任助教→助教：3名、博士研究員→講師：1名（上述）、助教→准教授：5名、助教→准主任研究員等：2名、講師→准教授：1名、准教授→教授：1名。

8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）（1ページ程度）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

総括班

領域全体集会、ワークショップ、共催国際会議の開催経費や旅費支援に使用した。領域の研究意義や成果を広く発信するために、和英双方のWEBページを整備した。また、会計・情報とりまとめ・広報のために事務補佐員を一名雇用している。

分子雲実験班

研究費の主たる用途は、新規光化学反応実験装置の開発であり、具体的には、真空チャンバー、800Kまで加熱可能な極低温冷凍機、高輝度紫外線源、ガス分析用の高質量分解能四重極型質量分析計、ガス混合装置からなる。開発は終了し、模擬星間分子雲有機物のルーチン的な作製が可能になった。また、極低温超高真空TEM用のCCDカメラを購入した。加えて、現有装置での実験に必要な比較的少額の備品費(真空ポンプ、オシロスコープ等)、消耗品費、旅費として使用した。光化学反応実験補助のために、技術支援職員を雇用している。

原始惑星系実験班

研究費の主な用途は、2種類の大型実験装置に関わるものであり、大部分は計画通りに使用した。北海道大学に設置した触媒反応装置はすでに稼働している。SPring-8に設置した顕微XANES装置は、前段階（低空間分解能仕様）はほぼ完成し、予備実験を開始している。第二段階に関しても筑波大学とSPring-8の連携によりWolter鏡を製作中であり、これによって高空間分解能化が達成される予定である。その他の消耗品、旅費などもほぼ予定通りに使用しているが、SPring-8において雇用予定であった博士研究員の雇用が、想定していた人物の事情から予定より遅れており、繰り越しをおこなった。

理論班

主な設備として、シミュレーション用のワークステーションと大容量データサーバ、並列計算・データ処理用のパーソナルコンピュータを導入した。これらの設備を用いて、古典分子動力学計算および、ダイレクト・アブイニシオ分子動力学計算、第一原理計算、数値シミュレーション(化学反応ネットワーク計算)等の理論計算と解析を実施している。人件費については、博士研究員1名の雇用に充て、表面反応のダイレクト・アブイニシオ分子動力学法を用いた計算研究を強化している。研究組織構成員および大学院生の学会等の旅費を支出した。

観測班

観測研究のための高性能計算機やデータストレージ等の購入、および、IRAM 30 m電波望遠鏡などによる観測研究の実施旅費に用いている。平成26年8月からは外国人博士研究員を雇用している。一方、THz帯受信機および230 GHz帯受信機の開発のために、それぞれのカートリッジ局部発振源、導波管マウント、冷却増幅器などのコンポーネントを購入するとともに、受信機テストのための冷却ジュワー（2つの受信機で共用）装置一式を措置し、東京大学に設置した。この冷却ジュワーはASTE 10 mサブミリ波望遠鏡に搭載されているものとコンパチブルであり、この措置により、搭載前に受信機の試験・評価が十分にできるようになった。

分析班

合成星間有機物と隕石有機物の分析のため最新鋭の液体クロマトグラフ質量分析計を福岡工業大学に新規導入整備した。この経費が研究費使用の最も大きい部分を占める。この装置は現在分析条件の最適化などの調整がほぼ終了し、分子雲実験班が合成した模擬星間有機物の網羅的な分析等に活用している。この装置の立ち上げと分析を行うため、九州大学で博士研究員を1名、また、現有装置を使った有機物分析を行うため、北海道大学とJAMSTECにおいて博士研究員を各1名（うち1名は外国人）雇用し、若手育成を図っている。これらの装置の維持費と試料調整のために消耗品費を使用している。

9. 総括班評価者による評価（2ページ程度）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

本研究領域では、田近英一教授（東京大学大学院新領域創成科学研究科，地球惑星科学），百瀬宗武教授（茨城大学理学部，電波天文学），渡部潤一教授（国立天文台，太陽系観測天文学）に評価担当を依頼している。評価担当の先生には、可能な場合には研究集会に出席して頂き、研究成果の把握をお願いしている。今般の評価にあたっては、中間報告書（案）を読んで頂くとともに、研究成果の全貌を正確に把握して頂くために、各計画研究の代表者が研究成果を評価担当者に説明し、議論をする機会を設けた。それをもとに、以下に示す評価を作成して頂いた。

東京大学 田近英一教授

本領域は、星間分子雲から原始惑星系に至る過程において生じる分子進化、とりわけ氷と有機物の形成と進化を物質科学的に明らかにしようとするものである。惑星形成論に化学的・物質科学的視点を導入することによって、その全体像の理解が格段に進展することが期待される。

現在、本領域の発足後2年余りが経過した段階ではあるが、すでにいくつかの重要な成果を挙げている。たとえば、透過型電子顕微鏡と原子間力顕微鏡を用いてアモルファス氷の可視化に成功し、それが結晶氷よりも小さいナノスケールの塊の凝集体であり、針状構造をつくっていることを明らかにしている。このようなアモルファス氷表面構造の解明は、氷の表面反応を理解する上で必要不可欠である。実際、アモルファス氷表面においては反応が劇的に進行することも明らかにしているが、これはアモルファス氷の表面構造の特性に由来する H 原子の量子トンネル効果によるものであるものと考えられる。分子動力学計算によって、アモルファス氷表面には低密度層が存在しており、配位数の少ない孤立分子の存在がアモルファス氷表面の高い反応性の起源である可能性も示された。アモルファス氷表面の構造特性・反応特性の多角的な理解がさらに進むことを期待する。そのほかにも、アモルファス珪酸塩薄膜の生成、模擬原始惑星系円盤環境における有機分子の生成、SPring-8 に顕微 XANES 装置を設置して画像取得に成功するといった成果も挙げている。さらに、ALMA を用いた WCCC 天体の観測によって原始星エンベロープの遠心力バリアを発見したこと、そこで化学組成が大きく変化する様子を捉えることに成功したことは、特筆すべき画期的な成果であるといえよう。今後、原始星近傍の物理・化学構造が統計的に明らかになることも期待できる。また、世界最高感度での分子構造解析と同位体分析手法の開発も順調であり、圧倒的な高精度分析法が確立しつつあることも非常に優れた成果である。実験班と分析班の連携など班間連携も密に行われていること、さらには若手研究者による WS の自主的な企画及び主体的参加など、2年間で6回の WS の開催を通じて若手研究者の育成や連携を強く促していることなども大変高く評価できる。今後、若手研究者同士や班内・班間の連携など新学術領域研究ならではのといえるような研究成果を挙げられることにも期待したい。

このように、中間評価の段階ではあるが、計画は順調に遂行されており、これまでに得られた成果には当初の想定を超えるものも含まれていることから、現段階における本領域の活動は非常に優れたものであると評価できる。

茨城大学 百瀬宗武教授

主に電波天文観測により原始惑星系円盤を研究している立場から評価を行う。本領域は、分子レベルまで突き詰めて物質に対する基本的理解を深めようとする実験・理論研究(A01,02,03)を基軸としつつ、星・惑星系形成領域に対する天文観測(A04)及び太陽系始原物質に対する分析研究(A05)とも連携し、星間物質から惑星へと至る過程における物質進化の解明を目指している。

現段階では開発途上の装置・手法もあるが、一方ですでに、アモルファス氷を扱った実験・理論や、カンラン石結晶面に対する表面エネルギー第一原理計算などで、注目すべき成果があがっている点を歓迎する。これらの意義は、純粋に物質科学的に興味深いというだけに留まらない。ALMA が稼働し、原始星エンベロープや原始惑星系円盤の構造がかつてない高い解像度で明かされつつある中で、これらの観測結果を正しく解釈していくためには、円盤構成物質の性質を背景知識として十分取り込むことが必要不可欠となる。一方で、天文観測が提供する情報には、実験室では得られない極限環境下

での分子の振る舞いを知る手がかりも含まれるはずで、今後それらが基礎物質科学の展開にも活用されることを期待したい。実際、ALMAによる原始星円盤のSO検出に触発され、衝撃波領域における揮発性分子の蒸発機構の理論研究が開始されており、心強く感じた。

本領域の活動を通じて、実験や理論から得られた物質科学的情報をいち早く天文観測・太陽系物質分析へと適用できる体制が構築されつつあることは、関連研究分野における我が国の競争力を高めるのにも大きく寄与するだろう。中間審査の段階としては、期待以上に手法間連携が進みつつあるという率直な印象を持った。それぞれの研究手法が確立した後も、独立分化してしまうのではなく、この連携体制を維持・発展させてほしい。現時点で目立った改善点は見当たらなかったが、強いていうと、赤外線天文分野との連携がさらに意識されるとより良いと感じた。もともと、公募研究では関連テーマが複数採択されているので、当該グループとの連携の今後の進展に期待したい。

国立天文台 渡部潤一教授

本研究は、ダイナミックに変化していく宇宙環境の中で分子がどのように進化していくかについて明確にするために、実験・観測・理論・分析といった様々な手法により多角的に研究を行い、それらを結びつけて統一的描像を描く試みである。本研究テーマは、きわめて学際的な色彩が強い。隕石の中から微量物質を取り出す分析については鉱物学・隕石学、実際の宇宙に浮かぶ星間分子を捉えることに関しては天文学、分子の振る舞いや合成をシミュレーションするのは化学および計算機科学、そして実験室内で宇宙環境を模した実験を行なうことに関しては実験化学と、多方面・多岐にわたる手法により研究されてきた。日本の研究グループは、それぞれ成果を上げてきたことは確かであるが、これまでは断片的な報告が成されることがあっても、研究分野の違いなどによって、それらが有機的に繋がりにくいのが難点であった。そこで、天文学から惑星科学、化学に至るまでのグループを形成し、断片的なこれまでの知見を系統的に見直すと共に、それぞれに新しい手法を用いてフロンティアを開拓し、星間空間の分子の進化を星間雲の状況から、原始惑星形成に至るまで統一的に明らかにしようとしている。この大きな筋道は実に明確であり、意義深いものである。

特に新しい手法により、それぞれの班での進捗は著しい。原始惑星実験班における結像型軟X線顕微鏡の開発、観測班における国立天文台のASTE電波望遠鏡やALMA望遠鏡を用いた観測、分析班における液体クロマトグラフ質量分析計の導入と、紫外線照射実験装置の開発、理論班での新規計算手法の開発・シミュレーションとなど、それぞれユニークな装置開発および研究成果を生み出しつつある。また、ひとつの班での進捗成果が他の班が敏感に反応する例があるなど、班同士の連携も旨くいっていると感じる。手薄になりがちな連携を総括班がコーディネートし、関連する研究にも目を配っており、また海外の研究動向にも目を光らせて居る点は、きわめて高く評価してよい。

今後は、本研究のそれぞれの班で開発してきた、それぞれの測定装置等の定常的な運用を行い、ユニークな研究成果を出していくと共に、有機的な連携によって、当初目的としていた宇宙における分子進化の統一的理解にむけて引き続き努力を望みたい。

10. 今後の研究領域の推進方策（2ページ程度）

今後どのように領域研究を推進していく予定であるか、研究領域の推進方策について記述してください。また、領域研究を推進する上での問題点がある場合は、その問題点と今後の対応策についても記述してください。また、目標達成に向け、不足していると考えているスキルを有する研究者の公募研究での重点的な補充や国内外の研究者との連携による組織の強化についても記述してください。

本研究領域の目的を実現するために、各研究項目を以下の方策に則って更なる研究を推進するとともに、各計画研究間の連携をいっそう強化する。「6. 研究組織と各研究項目の連携状況」に記述したように、連携研究は当初の想定以上に活発に行われているので、今後も総括班が中心となって、全体集会、総括班会議やワークショップ等を通じて、さらに活発な連携研究が推進されるように配慮していく。

平成26, 27年度の2年間の公募研究では、計画研究と密接に連携して行う研究と計画研究がカバーしていない重要な研究を採択して、本領域の研究を推進してきた。特に、萌芽的な研究課題は本領域の終了後の発展も見込んだ若手研究者が主体的に行う息の長い研究課題であると位置づけている。このような意味では、適切な研究課題を採択できたと考えている。いっぽう、理論的な研究課題は比較的多数の優れた課題が採択されたが、A02, A05に関連する研究課題は応募・採択件数とも少なめであった。平成28, 29年度の公募研究の募集にあたっては、関連分野への周知をこれまで以上におこない、A02, A05と関連する優れた研究課題を積極的に取り入れたい。

【研究項目A01】分子雲における氷・有機物生成（分子雲実験班）

星間分子雲における極低温表面原子反応および光化学反応による分子生成と変化過程の解明に向けて、引き続き、次の研究課題を推進する。

1. アモルファスH₂O氷の構造解析

AFMを用いた表面構造の観察（異なる蒸着速度、基板温度）を進めるとともに、氷の構造を反射型高エネルギー電子線回折装置で同時に測定する。また、ケルビンプローブ法による表面電位測定を行う。さらに研究を進展させ、アモルファスケイ酸塩基板を用いた実験を行う。アモルファス氷の構造や諸物性値（表面積、表面電位、自己拡散係数）も見積もる。

2. 表面に吸着した原子による化学反応

多環芳香族炭化水素や模擬分子雲有機物とD原子の反応に関する実験を行う。表面反応が量子トンネル効果で進む場合、今回の研究で量子トンネル表面反応が原子の拡散律速である時は同位体効果が極めて小さくなることが分かった。今後、この同位体効果の小さな量子トンネル表面反応と分子雲で観測される重水素濃集（宇宙のH/D比から予測されるよりも、重水素をもつ分子の存在比が高いこと）に着目して研究を進める。

3. H₂Oや有機分子(CH₃OH, NH₃など)を含む氷の光化学反応

模擬分子雲有機物の起源分子を特定するため、ガス混合比を変えた実験や同位体ラベルされたガスを用いた実験を実施する。さらに(H₂O, CO, CH₂DOH, NH₃)混合氷+UVの光化学反応によるキラルグリシン生成実験を行う。化学組成だけでなく、残渣有機物の構造形成の理解に向け、分析班と連携して、温度上昇時の有機物組織のその場観察を試みる。また、原始惑星系における有機物の加熱変成を調べるため、残渣有機物の加熱実験（組織・元素組成・同位体組成変化）を実施する。

【研究項目A02】原始惑星系における有機物生成とその進化（原始惑星系実験班）

開発を進めてきた実験装置の一台がすでに稼働を開始していること、理論計算やその場観察装置などの準備段階が終了したことから、班全体としての研究は新たな段階となる。

1. 原始惑星系円盤における触媒反応実験

原始惑星系円盤条件における触媒反応実験を系統的に行い、特に基板上で生成する分子と、表面から脱離する分子を観測する。反応に関与した表面（微粒子）は、透過型電子顕微鏡用雰囲気遮断ホルダーを用いて観察を行い、表面における化学変化の実体を明らかにする。また、実験残渣を分析班との協力により分析し、化学組成・同位体組成を明らかにする。

2. 結像型軟X線分光装置を用いた反応実験と装置の高空間分解能化

当初の2年間で開発した顕微XANES装置を用いて、1. で得られた実験試料残渣の観察を行うとと

もに、ケイ酸塩上の有機物形成をその場観察する実験も行う。この実験により、有機物形成に最も重要な結晶サイト、構造、分子などを特定し、原始惑星系円盤における有機物形成の支配過程、反応速度の全体像を明らかにする。さらに、リレータンデム配置した高倍率光学系 Wolter 鏡方式により空間分解能を 100nm 程度に向上させる。この装置自体の開発がきわめてチャレンジングな課題であり、本研究の重要な柱のひとつである。

3. 原始惑星系円盤の物理進化と化学過程を結合するモデル

理論班との連携により、原始惑星系円盤の物理進化と化学過程を結合するモデルの高度化作業を進める。特に、円盤の温度構造を物質と整合的に扱う方法を確立し、1. により得られた結果を直接的にモデルに摘要する。その結果、円盤進化にともなう有機物化学進化を理論的に扱うことが可能になる。

【研究項目A03】宇宙における分子生成と物質進化（理論班）

マイクロ過程の研究と、マイクロ過程の研究から得られる成果をもとに、分子雲および原始惑星系円盤で起こる多数の化学反応による分子進化を追跡するマクロ過程の研究に分かれて各課題を推進していく。

1. アモルファス表面における吸着・拡散および表面反応機構

表面吸着・拡散の方法論はこれまでの研究で確立したため、今後は、この手法をさらに他の系に拡張し、化学反応ネットワーク計算に必要となるパラメータを得るとともに現象の解明に力を注ぐ。研究対象としては、O, N, CO, NO等を選び、これらの氷表面への吸着メカニズムおよび拡散ダイナミクスを解明する。また、氷表面の有機物の光化学反応ダイナミクスを研究し、宇宙における化学進化のメカニズムを量子化学的アプローチから解明する。

2. 原始惑星系における低分子の熱変性過程

低分子の熱変性・蒸発過程に関して、以下の4つの方法で精密化を図る。i)氷ダストの熱履歴を決定する放射係数の定量化、(ii)珪酸塩コア-氷マントル型ダストのモデル化、(iii)現在想定していない氷成分 (CH₄, NH₃, H₂S, CH₃OH, SO₂など) の追加、(iv)氷ダスト蒸発に伴うガスの化学組成の変化。

3. 星間分子雲および原始惑星系における分子進化過程の全貌解明

塵表面反応については、マイクロ過程の研究および実験班で得られた塵表面の吸着分子に関するパラメータ(吸着確率、拡散定数、反応速度定数、脱離エネルギー等)を取り入れて、塵表面反応モデルを完成させる。最終的には、他班や公募課題の成果を統合し、星間分子雲から原始惑星系に至る過程の分子進化の新モデルを完成させる。このモデルは、既存モデルとは定性的に一線を画し、これまでほとんど手がつけられていなかったマイクロな素過程(極低温下の表面拡散、表面反応、光化学反応、同位体分別等の物理・化学過程)を取り入れた革新的なモデルとなる。

【研究項目A04】原始惑星系の化学的多様性とその進化（観測班）

本研究の目的である、化学組成の多様性とその惑星系への進化の観測的理解に向けて、引き続き次の研究課題を中心に取り組む。

1. 原始星近傍の遠心カバリアの存在の普遍性の確立

ALMA を用いて典型的な低質量原始星天体数個を高空間分解能観測し、炭素鎖分子およびその関連分子の分布と SO 分子の分布を相互比較して、遠心カバリアの位置を同定する。遠心カバリアは回転落下エンベロープと原始星円盤のつなぎ目に相当すると考えられ、その位置の同定により、原始星進化のどの段階で原始星円盤が作られるかを調べる。

2. 原始星近傍の遠心カバリアの構造および劇的¹化学変化の全貌の解明

ALMA を用いて、遠心カバリアが最も明瞭に見えている天体 L1527 において、遠心カバリアの構造を 20 AU 程度の分解能で明らかにする。これにより、遠心カバリアの位置でどのようにガスの角運動量が抜かれ、原始星円盤に繋がっていくかを解明する。さらに、スペクトル線サーベイを行い、遠心カバリア近傍でどのような物理・化学状態の変化が起きているのかを明らかにする。物理構造と化学変化の理解は原始星円盤形成に伴う化学進化の理解に必須であり、理論班、分子雲実験班、惑星系実験班と連携して化学変化の全貌の解明を目指す。

3. 化学組成の多様性の起源の探求

炭素鎖分子に富む WCCC 天体と飽和有機分子に富むホットコリノ天体が、一つの分子雲複合体の中にどのような割合で、どのように分布しているかを統計的に調べる。すでに、野辺山 45 m 鏡、およ

び IRAM 30 m 鏡でのペルセウス座分子雲での観測から、非常に興味ある兆候が見られており、これを ALMA を用いて確認する。

4. 分子雲における飽和有機分子の生成過程の探求

星なしコア TMC-1 (CP)で、気相反応起源かダスト起源かによって、分子のスペクトル線プロファイルが異なることを見出した。この手法を様々な分子に適用し、分子の起源を観測的に明らかにする。それを基に、理論班、分子雲実験班と連携し、分子形成過程の理解を深める。

5. ASTE 10 mサブミリ波望遠鏡による重水素化分子・飽和有機分子の観測

テラヘルツ帯(0.9-1.5 THz)のHEBミクサ受信機をASTE 10 mサブミリ波望遠鏡に搭載し、HDO, D₂O, H₂D⁺, HD₂⁺などの基本的重水素化分子の観測を行う。これによって、重水素濃縮を指標とした分子雲進化の描像の根幹を検証する。特に、HDO, D₂Oの観測は、星形成の初期段階における重水の割合を決定する上で、非常に重要である。また、230 GHz帯受信機を用いて、HCOOCH₃, (CH₃)₂Oなどの飽和有機分子のサーベイを広範に行う。

【研究項目A05】宇宙有機物の構造と同位体（分析班）

1. 極微量宇宙有機物試料の世界最高感度の分子構造解析と同位体分析手法の開発

導入した装置により各種有機物スタンダードのデータベース化を行い、迅速確実な分析が行える体制を構築する。また、世界最先端の二次元 HPLC 法を二次元 HPLC-MS 法に高め、アミノ酸の光学異性体のどちらに同位体濃縮が起きているかの判別を可能にし、宇宙におけるアミノ酸の成因解析につなげる。

2. 同位体トレーサーを用いた星間有機物生成経路の研究

分子雲実験班と共同で合成した試料の分析をさらに進めていく。多くの同族体のグループが存在することが分かったので、それらの分子構造を解明する。また、反応場のマトリックス（ケイ酸塩、グラファイトなどの表面反応）による物理および化学吸着と同位体分別の温度依存性の検証実験を新たに展開する。この時、アミノ酸前駆物質とアンモニア付加によるアミノ酸生成過程における同位体分別に着目し、炭素の伸長反応に伴う過程での同位体分別の特徴を明らかにする。

3. 隕石有機物と星間有機物をリンクするマーカー分子・マーカー官能基の探査

引き続き、隕石有機物の化学構造と同位体組成を解析し、星間有機物とのリンクから宇宙における化学進化を明らかにする。特に、炭素質隕石からメタノールが検出されなかったことと、アルデヒドとアンモニアの反応によって生成する化合物が多く検出されたことから、これらの化合物の構造解析と同位体比分析(¹³C/¹²C, D/H, ¹⁵N/¹⁴N)を重点的に行う。また、隕石有機物の酸素同位体分別の特徴を明らかにする。さらに、地球外物質中の有機物と同位体組成の不均一性の原因の解明のため、隕石の抽出有機物を用いて有機構造物の作成実験を行い、実際の隕石中の不均一構造の特徴と比較する。

以上の結果を総合し、星間雲中の反応機構における同位体濃縮過程と隕石有機物との関係を明らかにし、分子雲分子・原始惑星系分子と隕石有機物をリンクするマーカー分子・マーカー官能基を特定し、分子進化のマイクロプロセスを実証する。他班との共同研究により、星間雲から原始惑星系にいたる有機分子進化を解明する。