

領域略称名：次世代星間化学
領域番号：20A202

令和5年度
科学研究費助成事業「学術変革領域研究（A）」
に係る中間評価報告書

「次世代アストロケミストリー：
素過程理解に基づく学理の再構築」

領域設定期間

令和2年度～令和6年度

令和5年6月

領域代表者 国立研究開発法人理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員・

坂井 南美

目 次

研究組織

| | | |
|---|----------------------------|---|
| 1 | 総括班・総括班以外の計画研究 | 2 |
| 2 | 総括班・総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者 | 3 |
| 3 | 公募研究 | 7 |

研究領域全体に係る事項

| | | |
|----|------------------------|----|
| 4 | 研究領域の目的及び概要 | 10 |
| 5 | 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況 | 12 |
| 6 | 研究の進展状況及び主な成果 | 14 |
| 7 | 研究発表の状況 | 24 |
| 8 | 研究組織の連携体制 | 29 |
| 9 | 若手研究者の育成に係る取組状況 | 30 |
| 10 | アウトリーチ活動に係る取組状況 | 31 |
| 11 | 研究費の使用状況・計画 | 32 |
| 12 | 今後の研究領域の推進方策 | 33 |
| 13 | 総括班評価者による評価 | 35 |

研究組織

(令和5年6月末現在。ただし完了又は廃止した研究課題は完了・廃止時現在。)

1 総括班及び総括班以外の計画研究

| 研究項目[1] | 課題番号 研究課題名 | 研究代表者 氏名 | 所属研究機関・部局・職 | 人数[2] |
|------------------------------|---|-------------|-------------------------------------|-------|
| X00 総 | 20H05844 次世代アストロケミストリー： 素過程理解に基づく学理の再構築 | 坂井 南美 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・主任研究員 | 6 |
| A01 計 | 20H05845 高感度・高分解能観測で探る 惑星系形成領域の化学進化 | 坂井 南美 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・主任研究員 | 9 |
| A02 計 | 20H05846 太陽系形成時の化学環境の解明 | 橋 省吾 | 東京大学・ 大学院理学系研究科・教授 | 7 |
| A03 計 | 20H05847 気相・固相の反応素過程に基づく 中間温度における分子進化モデル | 相川 祐理 | 東京大学・ 大学院理学系研究科・教授 | 7 |
| A04 計 | 20H05848 先端ビーム制御による気相化学 反応素過程の理解 | 中野 祐司 | 立教大学・理学部・准教授 | 6 |
| A05 計 | 20H05849 単分子表面分光手法を用いた 塵表面における反応素過程の 単一分子レベル解明 | 今田 裕 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・上級研究員 | 7 |
| 計 | | | | |
| 計 | | | | |
| 計 | | | | |
| 計 | | | | |
| 総括班及び総括班以外の計画研究 計 6 件（廃止を含む） | | | | |

[1] 総：総括班，計：総括班以外の計画研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

2 総括班及び総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者

研究項目：X00

研究課題名：次世代アストロケミストリー：素過程理解に基づく学理の再構築

| 代表／ 分担 | 研究者氏名 | 所属研究機関・部局・職 | 役割分担 |
|-----------|-------|-------------------------------------|------------------------|
| 代表 | 坂井 南美 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・主任研究員 | 総括・科学方針議論（観測） |
| 分担 | 橘 省吾 | 東京大学・ 大学院理学系研究科・教授 | 事務局・広報・科学方針議論（太陽系始原物質） |
| 分担 | 中野 祐司 | 立教大学・理学部・准教授 | 科学方針議論（気相反応） |
| 分担 | 相川 祐理 | 東京大学・ 大学院理学系研究科・教授 | 科学方針議論（理論） |
| 分担 | 今田 裕 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・上級研究員 | 科学方針議論（表面反応） |
| 分担 | 渡部 直樹 | 北海道大学・ 低温科学研究所・教授 | 分野連携 |
| 合計 6 名 | | | |

研究項目：A01

研究課題名：高感度・高分解能観測で探る惑星系形成領域の化学進化

| 代表／ 分担 | 研究者氏名 | 所属研究機関・部局・職 | 役割分担 |
|-----------|-------|-------------------------------------|----------------------|
| 代表 | 坂井 南美 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・主任研究員 | 総括・観測・分光実験 |
| 分担 | 大屋 瑤子 | 京都大学・ 基礎物理学研究所・講師 | 太陽型原始星円盤観測 |
| 分担 | 廣田 朋也 | 国立天文台・ 水沢 VLBI 観測所・准教授 | 大質量星円盤観測 |
| 分担 | 酒井 剛 | 電気通信大学・大学院 情報理工学研究科・准教授 | 大質量星観測・広帯域受信機開発 |
| 分担 | 渡邊 祥正 | 芝浦工業大学・工学部・ 准教授 | 太陽型原始星円盤/近傍銀河観測・分光測定 |
| 分担 | 山本 智 | 総合研究大学院大学・ 理事 | 化学過程解釈・分子分光データ解析 |
| 分担 | 下西 隆 | 新潟大学・自然科学系・ 准教授 | 赤外線氷観測・近傍銀河の原始星円盤観測 |

| | | | |
|--------|-------|-----------------------------------|---------------------|
| 分担 | 小山 貴裕 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・研究員 | 分子分光データ解析 |
| 分担 | 楊 耀綸 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・研究員 | 大型有機分子サーベイ観測・赤外線氷観測 |
| 合計 9 名 | | | |

研究項目 : A02

研究課題名 : 太陽系形成時の化学環境の解明

| 代表／ 分担 | 研究者氏名 | 所属研究機関・部局・職 | 役割分担 |
|-----------|--------|------------------------|-------------------|
| 代表 | 橘 省吾 | 東京大学・ 大学院理学系研究科・教授 | 総括・光化学実験・変質実験 |
| 分担 | 瀧川 晶 | 東京大学・大学院 理学系研究科・准教授 | 光化学実験・変質実験 |
| 分担 | 奈良岡 浩 | 九州大学・ 理学研究院・教授 | 実験試料・地球外試料元素分析 |
| 分担 | 藪田 ひかる | 広島大学・先進理工系 科学研究科・教授 | 実験試料・地球外試料構造分析 |
| 分担 | 岡崎 隆司 | 九州大学・ 理学研究院・准教授 | 実験試料・地球外試料揮発性成分分析 |
| 分担 | 松本 恵 | 東北大学・ 理学研究科・助教 | 実験試料・地球外試料組織観察 |
| 分担 | 塚本 尚義 | 北海道大学・ 理学研究院・教授 | 実験試料・地球外試料同位体分析 |
| 合計 7 名 | | | |

研究項目 : A03

研究課題名 : 気相・固相の反応素過程に基づく中間温度における分子進化モデル

| 代表／ 分担 | 研究者氏名 | 所属研究機関・部局・職 | 役割分担 |
|-----------|-------|-----------------------|-------------------|
| 代表 | 相川 祐理 | 東京大学・ 大学院理学系研究科・教授 | 総括・化学反応ネットワーク数値計算 |
| 分担 | 古家 健次 | 国立天文台・ 科学研究部・特任助教 | 気相-固相相互作用の数値モデル構築 |
| 分担 | 高柳 敏幸 | 埼玉大学・ 理工学研究科・教授 | 量子化学計算 |
| 分担 | 山崎 祥平 | 弘前大学・ 理工学研究科・准教授 | 量子化学計算 |

| | | | |
|--------|-------|-----------------------|--------------|
| 分担 | 花輪 知幸 | 千葉大学・ 先進科学センター・教授 | 輻射流体計算 |
| 分担 | 吉田 直紀 | 東京大学・ 大学院理学系研究科・教授 | 輻射流体計算 |
| 分担 | 渡部 直樹 | 北海道大学・ 低温科学研究所・教授 | 固相反応メカニズムの解明 |
| 合計 7 名 | | | |

研究項目：A04

研究課題名：先端ビーム制御による気相化学反応素過程の理解

| 代表／ 分担 | 研究者氏名 | 所属研究機関・部局・職 | 役割分担 |
|-----------|-------|-------------------------------|------------------|
| 代表 | 中野 祐司 | 立教大学・ 理学部・准教授 | 総括・イオン-中性原子反応 |
| 分担 | 飯田 進平 | 東京都立大学・ 理学研究科・助教 | 異性体識別された分子イオン反応 |
| 分担 | 田沼 肇 | 東京都立大学・ 理学研究科・教授 | 温度可変イオン分子反応 |
| 分担 | 椎名 陽子 | 立教大学・ 理学部・助教 | 光脱離による中性原子ビーム生成 |
| 分担 | 木村 直樹 | 国立研究開発法人理化学研 究所・開拓研究本部・研究員 | 分子イオン源開発と分子イオン冷却 |
| 分担 | 岡田 邦宏 | 上智大学・ 理工学部・教授 | 極性分子-原子分子イオン反応 |
| 合計 6 名 | | | |

研究項目：A05

研究課題名：単分子表面分光手法を用いた塵表面における反応素過程の単一分子レベル解明

| 代表／ 分担 | 研究者氏名 | 所属研究機関・部局・職 | 役割分担 |
|-----------|-------|-------------------------------------|--------------------|
| 代表 | 今田 裕 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・上級研究員 | 総括・単分子反応の観測と解析 |
| 分担 | 杉本 宜昭 | 東京大学・大学院新領域 創成科学研究科・准教授 | AFM による表面素過程の観測と解析 |
| 分担 | 清水 智子 | 慶應義塾大学・ 理工学部・准教授 | 塵モデル表面の STM による評価 |
| 分担 | 金 有洙 | 国立研究開発法人 理化学研究所・ 開拓研究本部・主任研究員 | 塵モデル表面の作製と評価 |

| | | | |
|--------|--------|------------------------|----------------------|
| 分担 | 数間 恵弥子 | 東京大学・大学院 工学系研究科・准教授 | 光 STM による単分子反応の観測と制御 |
| 分担 | 日高 宏 | 北海道大学・ 低温科学研究所・助教 | AFM による氷表面構造の実空間測定 |
| 合計 6 名 | | | |

3 公募研究

| 研究項目 [1] | 課題番号 研究課題名 | 研究期間 | 研究代表者 氏名 | 所属研究機関・部局・職 | 人数 [2] |
|----------|--|---------------------|----------------|---|-----------|
| A01 公 | 21H05420 同位体分別過程化学を 共通言語とした，惑星大気・ 星間化学融合研究分野の創成 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 飯野 孝浩 | 東京大学・情報基盤 センター・特任准教授 | 1 |
| A02 公 | 21H05414 ヘキサメチレンテトラミンがつなぐ 星間分子雲と太陽系の分子進化 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 大場 康弘 | 北海道大学・ 低温科学研究所・准教授 | 1 |
| A02 公 | 21H05424 小惑星リュウグウの二次鉱物と 有機物：水質変成時の相互作用と 太陽風照射の影響の解明 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 野口 高明 | 京都大学・ 理学研究科・教授 | 1 |
| A02 公 | 21H05431 小惑星リュウグウの表面で独自に 進行した有機物進化の解明 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 松本 徹 | 京都大学・ 白眉センター・特定助教 | 1 |
| A02 公 | 21H05439 偏光近接場による星間塵 ナノ微粒子のキラル分子科学 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 成島 哲也 | 分子科学研究所・ メゾスコピック計測研究 センター・特別訪問研究員 | 1 |
| A02 公 | 21H05444 超精密定量分析に向けた 次世代X線分光検出器の研究 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 林 佑 | 国立天文台・先端技術 センター・特別客員研究員 | 1 |
| A03 公 | 21H05415 ダイレクト・アブイニシオ MD法による光誘起・宇宙化学 反応の理論解明 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 田地川 浩人 | 北海道大学・ 工学研究院・助教 | 1 |
| A03 公 | 21H05416 QuantumChemical Determination of the Complex Organic Molecules Formation in the Interstellar Medium | 令和3年度 ～ 令和4年度 | Sameera W.M.C. | 北海道大学・低温科学 研究所・外国人客員研究員 | 1 |
| A03 公 | 21H05419 星間空間におけるアミノ酸ホモキラ リティー生成過程の量子化学的探求 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 堀 優太 | 筑波大学・計算科学 研究センター・助教 | 1 |
| A04 公 | 21H05418 分子・クラスター負イオンの 炭素鎖成長反応における速度定数の 温度依存性の定量的観測 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 大下 慶次郎 | 東北大学・ 理学研究科・助教 | 1 |
| A04 公 | 21H05429 芳香族分子を含有するイオン錯体の 極低温気相分光とその光化学反応 過程の解明 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 井口 佳哉 | 広島大学・先進理工系 科学研究科・教授 | 1 |

| | | | | | |
|----------|--|---------------------|-------|---|---|
| A04 公 | 21H05430 準低温化学研究の開拓のための 量子状態と反応温度の同時制御 実験法の開発 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 高口 博志 | 広島大学・先進理工系 科学研究科・准教授 | 1 |
| A04 公 | 21H05434 イオン種に対する広帯域・ 高分解能分子分光の実現と 星間イオン化学研究への応用 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 水瀬 賢太 | 北里大学・ 理学部・講師 | 1 |
| A04 公 | 21H05442 気相イオンと星間塵表面の 協働反応：複雑有機分子生成の 新しい反応過程の探索 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 中井 陽一 | 国立研究開発法人理化学 研究所・仁科加速器科学 研究センター・専任研究員 | 1 |
| A04 公 | 21H05443 星間化学反応の全貌解明に向けた 次世代中性分子検出システムの開発 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 奥村 拓馬 | 東京都立大学・ 理学研究科・助教 | 1 |
| A05 公 | 21H05421 単結晶ケイ酸塩鉱物表面における 水素分子と一酸化炭素の吸着・ 触媒反応素過程の解明 | 令和3年度 ～ 令和4年度 | 羽馬 哲也 | 東京大学・大学院 総合文化研究科・准教授 | 1 |
| A01 公 | 23H03984 時間変動で分類したメーザー源 サンプルに基づく大質量原始星 周囲のガス化学の探求 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 百瀬 宗武 | 茨城大学・ 理工学研究科・教授 | 1 |
| A02 公 | 23H03980 地球外物質中「プロト核酸塩基」の 検出とその生成メカニズム解明 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 大場 康弘 | 北海道大学・ 低温科学研究所・准教授 | 1 |
| A02 公 | 23H03986 先端X線分析によるリュウグウ 母天体の形成環境や水質変成に 関する分子地球化学的研究 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 高橋 嘉夫 | 東京大学・ 大学院理学系研究科・教授 | 1 |
| A02 公 | 23H03995 星間塵から出発する鉱物進化に おける間隙水の機能 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 深澤 倫子 | 明治大学・ 理工学部・専任教授 | 1 |
| A03 公 | 23H03993 水素の量子効果を考慮した 新規量子化学による星間分子雲に おける重水素濃縮機構の解明 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 立川 仁典 | 横浜市立大学・生命ナノ システム科学研究科・教授 | 1 |
| A03 公 | 23H03996 機械学習分子動力学法による 星間塵表面モデルの作成と検証 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 奥村 雅彦 | 国立研究開発法人日本原子 力研究開発機構・システム 計算科学センター・ 研究主幹 | 1 |
| A04 公 | 23H03981 原始太陽系星雲内における 分子生成効率の理解に向けた 氷ナノ粒子の核生成実験 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 木村 勇氣 | 北海道大学・ 低温科学研究所・教授 | 1 |

| | | | | | |
|--------------------|---|---------------------|-------|--|---|
| A04 公 | 23H03990 重イオン衝突による有機分子からの 特異な負イオン生成過程 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 間嶋 拓也 | 京都大学・ 工学研究科・准教授 | 1 |
| A04 公 | 23H03992 星間環境におけるプロトン・ ヒドリド移動の選択性の解明 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 高口 博志 | 広島大学・先進理工系 科学研究科・准教授 | 1 |
| A04 公 | 23H03994 新規高感度・高分解能分光による 星間イオン種の構造と分子間相互 作用の研究 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 水瀬 賢太 | 北里大学・ 理学部・講師 | 1 |
| A04 公 | 23H03997 複雑有機分子生成への気相分子 イオンと氷星間塵表面の協働： 実験からのアプローチ | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 中井 陽一 | 国立研究開発法人理化学 研究所・仁科加速器科学 研究センター・専任研究員 | 1 |
| A05 公 | 23H03982 氷星間塵表面に吸着した ラジカル種の光脱離過程： 気相へのラジカル供給源を探る | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 柘植 雅士 | 北海道大学・ 低温科学研究所・助教 | 1 |
| A05 公 | 23H03987 地球外固体有機物の形成における 鉱物表面の触媒反応と氷の光反応の 寄与の定量的解明 | 令和5年度 ～ 令和6年度 | 羽馬 哲也 | 東京大学・大学院総合 文化研究科・准教授 | 1 |
| 公募研究 計 29 件（廃止を含む） | | | | | |

[1] 公：公募研究

[2] 公募研究は研究代表者が1名で実施

研究領域全体に係る事項

4 研究領域の目的及び概要

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、どのような点が「これまでの学術の体系や方向を大きく変革・転換させる」ものであるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

概要

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示すことがわかってきた。それとともに、ALMA 望遠鏡による観測で惑星系形成領域の様々な有機分子が捉えられ、天体ごとにその化学組成に大きな違いがあることも見えてきた。将来形成される惑星の化学組成へも影響し得るこの化学的多様性は、原始太陽系の化学環境が必ずしも普遍的なものであったわけではない可能性を示唆しており、この化学的多様性の起源とその全貌の解明が、生命溢(あふ)れる豊かな太陽系環境の起源を辿るためにも重要である。ロゼッタ、「はやぶさ2」などの始原天体探査によって太陽系物質が詳細に調べられるようになった今、この問題に正面から取り組むことが可能となりつつある。これらを統合して太陽系の物質的起源の統一的描像を得るためには、これまでの、低温低密度の単純な環境を前提としてきた星間化学を刷新し、惑星系形成領域のように、ガスや固体物質の組成が劇的に変化する広範な物理環境に対応できる強固な学術基盤を構築することが求められる。本研究領域は、最先端の分子科学研究との密接な連携の下、この大変革に挑戦し、太陽系の物質的起源の理解を飛躍的に進めるとともに、次世代アストロケミストリーとして新たな学理を創成する。

研究の学術的背景

宇宙において、“恒星や惑星系などの構造形成に物質がどのように関わり進化し、惑星へもたらされるのか”、また、“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得るのか”といった「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 望遠鏡や「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、天文学・地球惑星科学に新たな変革を起こす必要がある。個別に研究が進められてきた天文学と地球惑星科学を、宇宙における物質進化史として融合することではじめて、真の意味で宇宙の中での太陽系や地球、生命の存在を位置づけることが可能となる。

惑星系形成領域で当初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、という飽和・不飽和を「多様性の軸」としたものであった。この多様性の軸の起源としては、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」が最も有力と考えられている。一方、近年、他にも様々な「多様性の軸」が存在している可能性が見えつつある。可能な限り多くの軸とその起源を観測で明らかにし、全貌を掴むことが非常に重要である。しかしながら、その豊かな化学組成の多様性の起源やその先の惑星にまで至る進化を、ケーススタディの枠を超えて本質的に理解し、太陽系をその多様性に位置付けるためには、化学反応の素過程に基づく強固な学理が求められる。形成されたばかりの原始惑星系円盤で発見された化学的多様性は、その段階のみならず、その後の進化においても続いていくものである可能性が高い。その多様性を生む原因を究明するためにも、原子分子レベルからの基礎的理解が必要となっている。

しかし、これは、従来の星間化学の枠組みを大きく超えるものである。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 $10^4\text{--}10^6\text{ cm}^{-3}$: 圧力 $10^{-12}\text{--}10^{-10}\text{ Pa}$)の化学過程に着目してきたためである。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10–200 K)・中間密度($10^8\text{--}10^{10}\text{ cm}^{-3}$)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である。そこでの化学過程は、地上で起こる高温・高密度の熱平衡状態の化学過程とも異なり、種々の動的な現象を含むため、本格的に取り組むには、分子レベルでの物理・化学過程に立ち戻った学理の再構築が必須である(図1)。

目的と研究の全体構想

星間空間において、分子は、気相反応およびそこに含まれる固体微粒子(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、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、昇華温度の低い比較的単純な分子のみが気相に残る。そのため、塵表面と気相との分子のやりとりは極めて限定され、塵表面と気相における化学過程をそれぞれ独立に取り扱うことができた (図 1)。さらに、気相反応はエネルギーバリア (障壁) のない単純な反応しか起こらず、塵表面反応も極低温下で拡散できる水素原子などとの反応に限られる。このような単純さのため、極低温下における星間化学の研究は比較的良好に進んできたといえる。しかし、分子雲の収縮で星が誕生し、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、固着していた塵表面の (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、極低温では起こりにくいエネルギーバリアを伴う化学反応が進行する。こうした塵表面での活発な化学反応や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。このような、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、これまでの星間化学のフレームワークを大きく超えるものであり、広大な未踏の世界として残されている。本研究では、このような従来の極低温・極低密度に立脚した「星間化学」を大きく変革し、中間温度・中間密度に至る動的な化学過程を、物理学・化学分野との本格的協働によって分子レベルで理解する。これが「次世代アストロケミストリー」である。素過程理解に基づく学理の再構築により、惑星系形成領域の化学進化を真に理解し、太陽系や地球の起源を、宇宙での惑星系形成の一例として議論することが初めて可能となる。一方で、それは将来的に「宇宙における生命」を探求する強固な基盤ともなるだろう。

この目的を達成するために、本領域では 5 つの計画項目を設定している (図 1)。ALMA 望遠鏡やジェイムズ・ウェッブ宇宙望遠鏡 (JWST) など最先端の電波天文観測 (研究項目 A01 観測班) や、サンプルリターン試料を含む地球外物質の分析・始原物質再現/変質実験 (研究項目 A02 分析班) から得られた結果を、理論グループ (研究項目 A03 理論班) が推進する天体の物理進化過程と化学反応ネットワークを融合したモデルで読み解く。そのモデルの構築にあっては、惑星系形成領域で起こる豊かな化学現象を理解するための学理形成を目指した精密な気相反応実験 (研究項目 A04 気相実験班) や原子・分子レベルの表面反応実験 (研究項目 A05 表面実験班) など、最先端の分子科学研究による結果を取り込むとともに、理論検証として量子化学計算 (研究項目 A03) を活用する。その上で、理論グループがハブとなり、気相・表面実験の「ミクロ」と観測・分析の「マクロ」を繋 (つな) ぎ、研究領域全体の有機的連携を図る。このように、本研究領域では、観測・理論・分析・気相実験・表面実験の五つのアプローチから星間化学の変革を目指しており、これらは天文学、物理学、地球惑星科学、化学の分野に広くまたがっている。そのため、公募研究も極めて重要であり、広範な分野の研究者らによって星間化学反応の素過程の理解に資する基盤的知見を広げる研究や、計画研究と相補的・あるいは発展的研究推進する。

領域設定期間終了後に期待される成果

本研究の成果は、系外惑星研究とともに、惑星系の多様性を理解する上で重要な役割を果たすであろう。その過程で分子科学を含む物理学・化学の分野に新しい研究テーマを誘発することも期待される。また、素過程理解は、結果解釈のための科学から予測可能な科学への転換においても必須となる。起こりえる化学的多様性を予測することは、宇宙における化学進化の全貌を理解することに繋がるであろう。ひいては、太陽系の起源を、歴史学ではなく構造形成に伴う化学進化の結果として解釈することができるかと期待される。また、この変革は、惑星系形成領域のみならず、様々な天体现象に対応できる化学への転換も意味する。星や銀河中心核などの輻射で暖められた動的な流れを伴う様々な天体现象の理解に有用であり、一般的に宇宙における物質進化史を明らかにすることに資するであろう。

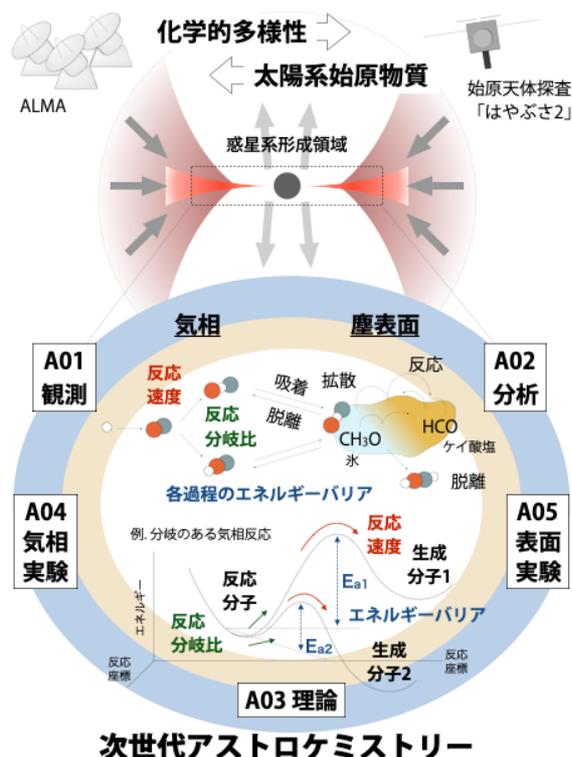


図 1 本領域のめざすところ

5 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、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、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

採択時にいただいた審査結果の所見は以下の通りである。

(審査結果の所見)

本研究領域は、天文学、星間化学及び惑星物質科学を融合したアストロケミストリーに、超大型電波望遠鏡 ALMA による惑星形成領域の観測や、はやぶさ2が持ち帰る炭素型小惑星の試料を用いて、新たな学術変革をもたらすことを計画している。観測や試料分析で好条件にある研究グループが、既存の研究分野を超えての異分野融合研究を推進する計画であり、期待が持てる。

観測や理論で明らかにされた星や惑星形成過程の動的進化を含めて、非平衡でかつ従来より中間的温度・密度領域のアストロケミストリーを追究して、はやぶさ2の持ち帰る試料と照らし合わせることにより、星・惑星形成の多様性の中での太陽系の立ち位置を明らかにする意欲的なプロジェクトである。

計画研究が5つとコンパクトであるが、計画研究間の連携を有機的に組織することが肝要である。そのためには、公募研究を活用することが重要である。惑星科学と天文学の本当の意味での学際的研究が開くことを期待する。このためには、両者の連携を促進するコーディネータ的研究者の存在も必要かどうか検討が望まれる。

所見の指摘（特に下線部分）を受け、総括班では次にあげる3つのアプローチを加えて、領域全体の運営を進めている。

- 1) 北海道大学低温科学研究所の渡部直樹教授を連携コーディネータとすると共に、2022年度からは総括班、2023年度からは理論班にも加え、強力な連携を図っている。2021年には渡部が中心となり総括班の坂井・相川と連携し、Astrochemistry に関する国際ワークショップを北海道大学低温科学研究所にてハイブリッド形式で開催した。参加者の専門は地球惑星科学・天文学のみならず、化学・物理学の広い分野にわたり、分野を超えた活発な議論がなされた。ヨーロッパ、米国からの参加がしやすくなるようプログラムを工夫するなどし、参加者は153名（国内82名、うち37名対面参加、海外71名）に上った。これらの場での議論を通じ、惑星科学と天文学の学際研究を進めるべく、現時点までに、観測班代表と分析班代表が共同で小惑星リュウグウ分析結果と天文観測結果をつなげる共同レビュー論文 (Tachibana and Sakai, Elements) を投稿、観測班・分析班・理論班メンバーが共同で ALMA 望遠鏡での観測提案を提出するなど、積極的に連携を進めている。
- 2) Astrochemistry に関わる広範囲の話題提供を研究計画メンバーや公募研究代表者に依頼し、1-2ヶ月に1回程度の頻度で領域全体のオンラインセミナーを開催している。有機的連携を促すために、最初は各研究項目に関連する基礎的な話題提供から始め、以降も、基礎から最先端までをカバーしながら、様々な話題に関し、多様な視点で議論する場を設けている（これまでの開催履歴を次ページに記す）。オンラインセミナーは録画し、領域全体で共有している。また、原子・分子・表面過程に関するオンラインセミナー（マイクロ懇談会）も1-2ヶ月に1回程度の頻度で開催している。ふたつのオンラインセミナーは、異なる学問的バックグラウンド（天文・地球惑星科学・化学・物理）を持つすべての研究項目の班員および公募研究者、ならびに関連研究をおこなっている大学院生や学部生からなり、極めて学際的な議論が行われている。なお、コーディネータである渡部教授には、いずれのセミナーにも当初から参加いただき、適宜コメントを貰うと共に分野をつなぐ議論を促していただいている。
- 3) 領域全体の研究内容の深化と学術領域としての新たな展開を目的に、公募研究の研究者らとの積極的な連携を始めている。全体集会での活発な議論のみならず、オンラインセミナーやマイクロ懇談会にも参加していただき、議論を頻回に行うことでより密な連携が可能となり、成果にも繋がっている。例えば、公募研究（A02班）の野口、松本徹、大場は研究計画班と密接に連携し、小惑星リュウグウサンプルの国際共同分析を成功させ、リュウグウ試料に初めての宇宙風化の証拠の発見、アミノ酸、核酸塩基であるウラシル、ビタミンB3であるナイアシンなどの生命前駆分子の検出に貢献し、研究計画班メンバーと多くの共同論文を発表した [A02 文献リスト A02-18, 19, 20 など]。公募研究（A03班）の Sameera は、計算化学研究者の立場から塵（氷）表面における物理化学過程にアプローチした。

先端的な量子化学計算を用い、表面実験グループによって明らかにされた氷表面での複雑有機分子生成に関わる表面反応の障壁や反応分岐比に関する知見を得た。A05 表面実験班との密接な連携から得られた成果は3つの査読付き論文に報告されている [A03 文献リスト A03-21, 22, 23]。また、公募研究 (A04 班) の中井は、気相化学 (A04 班)、表面化学 (A05 班) の境界領域の研究として、気相中の低エネルギーイオンによって誘起される氷星間塵表面の反応について独創的な研究を展開した。理論班 (A03) の古家や渡部らとも協力し、これまでに考慮されていなかった分子生成経路として、 DCO^+ イオンと H_2O 氷、及び、 CH_3^+ イオンとメタノール固体との間でイオン誘起反応の存在を示唆した [A04 文献リスト A04-12]。本公募研究は実験的にも気相、表面それぞれの高度技術の連携による成果であり、研究項目間連携によって学際的研究の促進に大きく貢献した。第2期公募研究にも採択されており、今後の発展が期待される。

次世代アストロケミストリーオンラインセミナーの講演者ならびに題目を以下に記す。

- 第1回 [3/23/2021] 坂井 南美 (A01 観測班) 「星形成過程におけるアストロケミストリー：観測編」
- 第2回 [4/27/2021] 橘 省吾 (A02 分析班) 「地球外物質が語る太陽系の起源と進化：基礎編」
- 第3回 [5/25/2021] 金 有洙 (A05 表面実験班) 「STM を用いた単分子分光：基礎編」
- 第4回 [6/26/2021] 相川 祐理 (A03 理論班) 「星形成過程におけるアストロケミストリー：理論編」
- 第5回 [7/13/2021] 中野 祐司 (A04 気相実験班) 「実験で探る星間ガスの原子分子過程：基礎編」
- 第6回 [8/19/2021] 渡部 直樹 (X00 総括班) 「星間塵表面過程の実験研究を概観する」
- 第7回 [9/7/2021] 渡邊 祥正 (A01 観測班) 「電波干渉計観測の基礎」
- 第8回 [10/26/2021] 奈良岡 浩 (A02 分析班) 「地球外物質の有機化合物分析」
- 第9回 [11/26/2021] 吉田 直紀 (A03 理論班) 「低金属量星間ガス中の化学反応と星形成」
- 第10回 [12/24/2021] 田沼 肇 (A04 気相実験班) 「移動管法とイオン分子反応の基礎」
- 第11回 [4/19/2022] 杉本 宜昭 (A05 表面実験班) 「原子間力顕微鏡を用いた個々の分子の高分解能観察」
- 第12回 [5/31/2022] 下西 隆 (A01 観測班) 「星間氷の赤外線観測」
- 第13回 [6/28/2022] 大場 康弘 (A02 分析班公募) 「Detection of nucleobases in carbonaceous meteorites」
- 第14回 [11/17/2022] 岡田 邦宏 (A04 気相実験班) 「イオントラップ法によるイオン-分子反応の実験的研究：これまでの研究と今後の展望」
- 第15回 [12/26/2021] 山崎 祥平 (A03 理論班) 「量子化学計算の基礎」
- 第16回 [1/17/2023] 羽馬 哲也 (A05 表面実験班公募) 「低温な星間塵の表面科学の実験研究 -最近20年間の経緯-」
- 第17回 [4/25/2023] 藪田 ひかる (A02 分析班) 「始原小天体中の固体有機物～その複雑な組成にこそ、天文学と物質科学を繋ぐ糸口がある」
- 第18回 [5/30/2023] 飯野 孝浩 (A01 観測班公募) 「サブミリ波分光による太陽系内惑星大気化学の進展」
- 第19回 [6/30/2023] 古家 健次 (A03 理論班) 「星・惑星系形成領域における同位体分別」
- 第20回 [7/26/2023] 柘植 雅士 (A05 表面実験班公募) 開催予定

6 研究の進展状況及び主な成果

(1) 及び (2) について、計画研究及びそれと連携している公募研究ごとに、具体的かつ簡潔に記述すること。
(一つの計画研究及び連携する公募研究で2頁以内)

(1) 領域設定期間内及び中間評価実施時までには何をどこまで明らかにしようとし、中間評価実施時までにはどこまで研究が進展しているのか

(2) 各計画研究で得られた成果、及びそれぞれの計画研究と連携している公募研究で得られた成果について、(計画研究・連携する公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。)

研究項目 A01 観測班：高感度・高分解能観測で探る惑星系形成領域の化学進化

(1) 観測班は、様々な環境下にある原始惑星系円盤形成領域に対して高感度・高分解能分子輝線観測を広範に展開し、①原始惑星系円盤の化学的多様性の全貌とその起源を明らかにする。また元素組成比などの②異なる環境にある天体の化学組成を、その物理構造とともに明らかにすることで、分子形成過程の解明に資する。領域全体からフィードバックとして得られる素過程の知見とあわせ、惑星系円盤形成領域で起こっている物理・化学現象を原子分子レベルで解き明かし、惑星系円盤の化学的多様性ならびに太陽系の物質的起源の理解を進める。また、高分解能分子分光装置を改良・運用し、③観測研究の推進に必要な有機分子同位体などのスペクトル線周波数の精密測定を並行して行う。中間評価実施時までには、飽和有機分子に着目した原始惑星系円盤形成領域の化学的多様性、銀河系外縁部や近傍銀河での有機分子存在量などを明らかにし、新たな多様性の軸を探ってきた。また、分光実験では、200-300 GHz 帯での CH_3OH の同位体種の分光測定、300-500 GHz 帯での測定に向けた超伝導受信機の開発を行った。

(2) 計画班および公募班の成果は以下の通りである。

① 化学的多様性の全貌とその起源の解明 (山本・大屋・渡邊・酒井・坂井・Yang・廣田・協力研究者)

30-50 au スケールで、環境に特徴のある原始惑星系円盤形成領域 10 数個に対して様々な分子のスペクトル線を高感度・多波長で観測し、エンベロップ・遠心力バリア・円盤 (図 2) それぞれに対し、物理状態を規定して分子の分布を明らかにしつつある。ALMA 大型プロジェクト FAUST (約 70 名からなる国際チームで山本・坂井は共同代表者) を主体としつつ、個別観測プロジェクトも推進した。その結果、飽和有機分子に富む天体において、 CH_3OH 分子や HCOOCH_3 分子などの有機分子は、遠心力バリア付近および原始星ごく近傍の暖かい領域の双方において気相中で増量していることがわかってきた [A01 文献リスト文献 A01-6, 7 他]。他方、 HCOOH 分子と NH_2CHO 分子は原始星ごく近傍でのみ増量していることが明らかになり、有機分子同士の分布の違いが見えてきた [A01-6]。天体ごとの物理構造や化学組成の違いも明瞭になりつつある [A01-14 他]。

100 au スケールでは、様々な星形成領域にある若い原始星を網羅的に化学観測し、統計的に原始惑星系円盤の多様性の全貌を調べている。ペルセウス座分子雲 (50 天体) での ALMA による観測データの解析を進めた結果、飽和有機分子が検出される天体が全体の 58 %にのぼることが分かった (PEACHES: 代表坂井)。しかし、天体ごとのガスの質量や明るさ・温度の違いを考慮したとしても、その存在量については 2 桁以上ものばらつきがある、すなわち化学組成が異なることも同時にわかった [A01-18, press released]。一方、飽和有機分子が検出された天体において、 CH_3OH 分子と CH_3CN 分子の存在量を比較すると強く相関していた。これらの分子の生成過程が似通っている、すなわち CH_3OH 分子が星間塵表面での CO 分子の水素付加反応によって作られるのと同様に、 CH_3CN 分子も塵表面反応が主体である可能性が高いためであると考えられる。なお、硫黄を含む分子についても天体ごとの存在量の違いがみられたため、統計的に存在量や傾向を調べた。その結果、 SO および SO_2 分子が円盤の端で気相中に増量していること、すなわち、ガスが円盤への降着する際のショック領域をこれらの分子がトレースしていることがわかった [A01-1, 8 他]。

1,000~10,000 au スケールでは、単一口径望遠鏡を用いて、ペルセウス座領域全体の化学組成分布を調べた。その結果、飽和有機分子が気相中に豊富な天体は、大きなスケールからのガスの流入が顕著な天体であることが多いことなども見えてきた (論文準備中)。

なお、原始惑星系円盤形成領域の化学の全貌を明らかにするためには、気相の化学組成と固相の化学

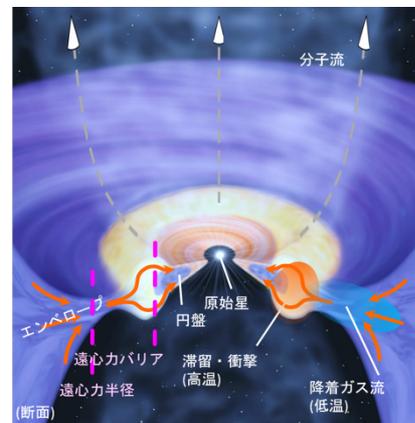


図 2 円盤形成領域のイメージ

組成の双方を観測する必要がある。このため、Yang が PI となり、ジェイムズ・ウェッブ宇宙望遠鏡 JWST による星間氷観測の研究も並行して進めている [A01-4, press released].

② 様々な環境下にある天体の観測による分子形成過程の解明 (下西・坂井・Yang・A03 理論班古家・他)

分子形成過程を原子・分子レベルで理解するには、様々な環境にある (元素存在度, 原始星質量, 星間紫外線強度などの異なる) 天体の観測が有効である。これは、実験室での研究では、設定条件を変えて実験することに対応する。そこで、ペルセウス座分子雲での化学サーベイ観測と並行して、海外の協力研究者らとともに、HII 領域に囲まれて紫外線にさらされたオリオン座分子雲 OMC-2/3 でも化学サーベイ観測 (ORANGES) を行った [A01-10, 16]。その結果、OMC-2/3 では 19 天体中 5 天体 (26%) の検出率で、やや飽和有機分子に富む天体の数が少ない傾向が見えた。感度は低いものの別のサーベイ観測プロジェクト ALMASOP (Yang が共同研究者として参加) でもオリオン座分子雲の観測が行われていたため、その結果も合わせて同等の感度換算をして検出率を導出すると、40 %程度であった [A01-11]。いずれにせよ、同等かあるいはやや少ない傾向にあることから、紫外線に曝された領域では飽和有機分子が少なくなっている可能性がでてきた。今後より詳細な比較検討が必要である (坂井・Yang・海外協力研究者ら)。

また、重元素量 (C, N, O よりも重い元素の量) が少ない大マゼラン雲, 小マゼラン雲, 及び天の川銀河外縁部でもホットコアを発見したためその化学組成を調べ、近傍の太陽型原始星の組成と比較した。前者では、重元素量を考慮してもやや CH₃OH 分子が少ないケースが見られた [A01-2]。元素量が少ないことで星間塵も少なく、星間紫外線の効果が強く表れている可能性などが考えられる。他方、後者では、元素量が少ない割には驚くほど存在量に違いがなかった。やや窒素を含む分子が少ない傾向にはあったが、CH₃OH に関してはむしろオリオン座の原始星などよりも多かった [A01-13]。宇宙線や星間紫外線の強さの違いなど、環境が与える効果を現在検証している (下西ら)。

明るさが定期的に変動している原始星での分子の分布も ALMA による観測で調べている。この天体は、バーストにより一時的に明るい状態が実現されるため、星間塵氷層から蒸発したばかりのガスの組成を調べることができる。この結果を、円盤が未だ形成過程にある若い天体での、遠心力バリアでのガスの組成、あるいは原始星ごく近傍でのガスの組成と比較することで、気相と固相の相互作用が化学組成にもたらす効果を明らかにできるため、詳細に解析を進めている (A03 理論班学生・協力研究者らと連携)。

大質量原始星まわりでも、円盤構造ができることが明らかとなりつつある。太陽系から最も近い大質量星形成にある原始星オリオン KL 電波源 I の ALMA 観測では、SiO や AlO, H₂O 分子輝線でアウトフローや円盤の構造がトレースできることを明らかにした [A01-3 他]。ここでは、原始星からの紫外線など強い輻射の効果や、高温状態であることなどから、揮発性分子のみならず不揮発性分子の昇華・再凝縮の探求を行うことが可能であることがわかってきた。そこで、NaCl や AlO をはじめとした不揮発性分子やそれらの同位体種の挙動を探るため、A02 分析班・A03 理論班と協働で、ALMA 望遠鏡に観測提案を行った (廣田・坂井・A02 分析班橘・A02 分析班瀧川・A03 理論班古家・協力研究者ら)。

③ 分子スペクトル線の静止周波数の精密測定 (小山・酒井・渡邊・山本・坂井・研究協力者)

ALMA 望遠鏡用超伝導受信機を検出器として使用した放射型ミリ波サブミリ波分子分光計 (SUMIRE) を用いて、他の有機分子生成の鍵となる メタノール分子とその同位体種 (¹³C, ¹⁷O, ¹⁸O, D など) のスペクトルの静止周波数を網羅的に測定した。また、得られたスペクトル線と観測データを比較することで、いくつかの未同定線の解明にも取り組んだ [A01-15, 18]。なかでも CH₂DOH は、その存在量を正確に導出することが太陽系の過去を探る上でも重要であるため、この分子に着目して詳細な解析をすすめた。¹³CH₂DOH のスペクトル線の周波数を明らかにして論文として出版すると同時に [A01-9], CH₂DOH については丁寧な強度較正を行うことで、5 %程度の精度でスペクトル線の強度についても決定した [Oyama et al., *ApJ*, submitted]。さらに、ALMA 望遠鏡でラインサーベイ観測が多く行われている Band 7 の周波数帯でも測定が可能となるように、超伝導受信機の開発を進めた。現在、周波数については十分な精度で測定が可能な状態である。今後、スペクトル線強度も十分な精度を達成できるよう開発を進める。

公募：同位体分別過程化学を共通言語とした、惑星大気・星間化学融合研究分野の創成 (飯野)

観測班では主に原始惑星系円盤形成領域に着目して研究を進めているが、そこでは将来的に惑星が形成される。このため、本研究は惑星大気研究の分野にも資するものである。そこで、公募研究として大気化学研究を推進した。ALMA により CH₃CN 分子 3 種の ¹³C 同位体比を測定し、土星衛星タイタンでは星間空間で見られるような濃集が見られず、低温で進む分別過程が働いていないことなどを示した [A01-19]。

研究項目 A02 分析班：太陽系形成時の化学環境の解明

(1) 分析班では、領域設定期間を通じ、地球外有機物の精密分析と再現実験により、太陽系形成時の初期化学状態を解明することをめざしている。中間評価までの最大の目標は、「はやぶさ 2」が持ち帰った小惑星リュウグウサンプル(図 3)の分析であった。公募研究とも連携し、小惑星リュウグウサンプルの有機/無機化学・鉱物学・岩石学的分析を 2021 年 6 月から開始し、リュウグウサンプルの化学組成が太陽系の材料を代表する基準(太陽系元素存在度の基準)となりうることを、リュウグウの元天体内部での水質変成で鉱物と有機物の共進化が起こったこと、一部の有機物は太陽系誕生前の分子雲で生成された可能性があること、リュウグウ有機物にはアミノ酸、核酸塩基など生命必須分子が存在することなど明らかになった。

(2) 2020 年 12 月に、探査機「はやぶさ 2」によって持ち帰られた小惑星リュウグウサンプルの初期分析(「はやぶさ 2」プロジェクトチームによる試料分析)を、2021 年 6 月より開始した。A02 班代表の橘が分析統括を務め、A02 班メンバーの藪田、奈良岡、岡崎、塚本、第 1 回公募研究の野口がそれぞれ固体有機物分析、可溶性有機物分析、揮発性物質分析、化学分析、砂の物質分析(微小粒子の岩石学・鉱物学)に関し、国際共同研究チームを組織して、分析をリードした。また、A02 班メンバー松本恵が、石の物質分析(mm サイズ粒子の岩石学・鉱物学)チーム、A02 班メンバー瀧川、第 1 回公募研究の松本徹が砂の物質分析チーム、第 1 回公募研究の大場が可溶性有機物分析チームに参加した。可溶性有機物分析チームには、班間連携の一環として、A05 表面実験班の杉本も参加した。第 1 回公募研究の林は、2021 年当時在籍していた宇宙科学研究所地球外物質グループメンバーとして、試料キュレーションや分配に協力した。分析班メンバーが中心となっておこなったリュウグウサンプル分析で得られた成果は、2023 年 2 月の Science 誌特集号を含め、30 本以上が出版または受理済み、20 本以上が改訂中または査読中であり、今後さらに論文が投稿される予定である。これまでの成果を以下に抜粋してまとめる。

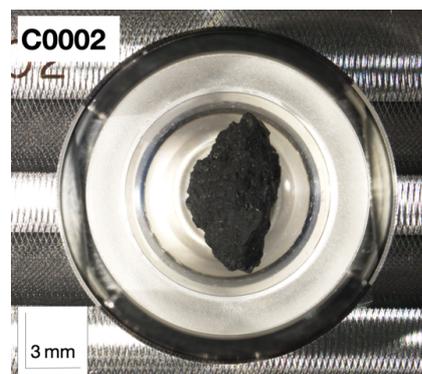


図 3 小惑星リュウグウでの二回目の着地で採取された粒子のひとつ。

- ・リュウグウ試料の形状と、「はやぶさ 2」探査機や搭載ローバーが撮影したリュウグウ表面粒子の形状比較をおこない、採取されたサンプルがリュウグウ表面を代表する試料であることを明らかにした [A02 文献リスト A02-17]。サンプル採取装置開発ならびにサンプル分析統括の橘が中心となって、研究をおこなった。
- ・リュウグウ試料は水素や希ガスなど揮発性の非常に高い元素を除き、太陽に等しい元素存在度をもつことが判明した。太陽系の材料となった元素が、揮発性元素を除き、元素分別を受けずにそのまま岩石となったものであることが明らかとなった [A02-15]。これまで太陽系元素存在度の決定に使われてきた隕石サンプル(CI コンドライト)は世界に 9 つしかなく、かつ、これらの隕石には、地球落下後の化学風化の影響が大きいこともわかり、リュウグウサンプルは今後、太陽系元素存在度を決定するための新しい基準物質となりうることが明らかとなった [A02-15]。塚本が主導した化学分析チームの成果である。
- ・リュウグウサンプルは水溶液と反応した含水鉱物や、水溶液から析出した炭酸塩、硫化鉄、磁鉄鉱を主成分とし、母天体での水質変成があったことが判明した [A02-14]。一部の硫化鉄内部の空隙に水溶液が封入されて、残されており、成分分析により、リュウグウの水質変成を起こした水溶液に CO₂ が含まれていたことが明らかとなった。CO₂の起源はドライアイスである可能性が高く、この場合、リュウグウ母天体は、ドライアイスが固体として存在する太陽系外側の低温環境で誕生したことを示唆する [A02-14]。松本恵がメンバーである石の物質分析チームの成果である。
- ・リュウグウサンプルの炭素総量は 3-6 wt%で、総炭素の約三分の一が有機物として存在していた。リュウグウは有機物を含む隕石試料と比較して、同等かより多く炭素を含むことがわかった [A02-8, 11, 15]。また、有機物に含有されていると考えられる希ガス成分の量も、CI コンドライトと同等かそれ以上であった [A02-11]。塚本、岡崎、奈良岡がそれぞれ分析を主導した。
- ・リュウグウサンプル中の有機物は、リュウグウ母天体(現在のリュウグウのもととなった微惑星)内部

での水質変成で、含水鉱物とともに形成されたものがあり、微小スケールでの鉱物と有機物の共存が確認された [A02-4, 7]. 藪田が主導した固体有機物分析チームの成果である (図 4 左).

- 一方、分子雲や原始太陽系の低温での化学過程の特徴でもある重水素や ^{15}N に濃集した固体有機物も検出され、母天体形成以前の化学進化の情報も残されている [A02-7] (図 4 左). また、一部の PAH (多環式芳香族炭化水素) は分子レベルの炭素・水素同位体分析より、星間分子であることが示唆された。藪田、奈良岡がそれぞれ主導した研究成果である.
- 固体有機物のバルク N/C 比の平均値は、太陽系元素存在度の N/C 比より小さく、Rosetta 探査機がその場分析を行なった 67P/Chulyumov-Gerasimenko 彗星の有機物と同様の値であることが、藪田らの分析で明らかとなった [A02-7]. 固体有機物の N/C 比は水質変成では大きく変化しないため、リュウグウに取り込まれる前の有機物の特徴を示し、今後、太陽系の初期化学条件を求める鍵であると注目している (図 4 左).
- 20,000 種以上の有機分子の分子式が決定され、生命前駆分子であるアミノ酸、RNA を構成する核酸塩基のひとつであるウラシル、ビタミン B₃ であるニコチン酸が含まれることも明らかとなった [A02-6, 8, 18] (図 4 右). アミノ酸はラセミ体として存在していることもわかった. 奈良岡ならびに公募研究代表の大場が中心となって進めた分析の成果である.
- リュウグウ表面は太陽風や微小隕石の衝突による宇宙風化の影響を受けていることが明らかとなった. 宇宙風化層では脱水も起こっていた. 公募研究代表の野口を中心に、松本徹、瀧川が参加した研究である [A02-19, 20]. リュウグウサンプル中の有機物や有機分子には宇宙風化の影響がさほど大きくないことも、藪田や奈良岡らが主導した分析で明らかとなった [A02-7, 8].
- リュウグウでの宇宙風化条件、太陽による加熱条件を室内実験で見積もった. 太陽風照射模擬実験はリュウグウでの宇宙風化の実証となる結果を得て、10³ 年程度の太陽風照射で観察される宇宙風化層が説明できることがわかった [A02-19]. また、リュウグウはかつて太陽に近づき、高温条件を経験したと探査機観測から推察されていたが、炭酸塩の真空熱分解実験より、これまで考えられてきたような加熱は受けていないことが明らかになった. これらの実験は瀧川・橘がおこなった.

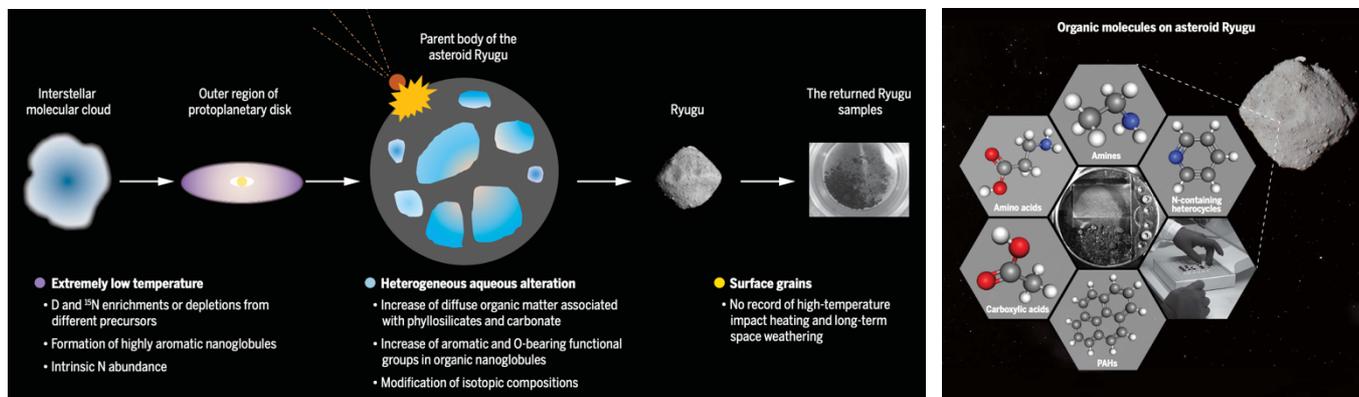


図 4 (左) リュウグウの固体有機物に記録された太陽系の誕生から母天体での鉱物-有機物相互作用 [A02-7]. (右) リュウグウサンプルから抽出された可溶性有機分子 [A02-8].

分析班に関連した公募研究においては、(1) 野口は前述のとおり、計画班と連携し、リュウグウサンプルの宇宙風化層の詳細観察・分析を進め、C 型小惑星で初めて宇宙風化を実証した [A02-19]. (2) 松本徹も同様に、リュウグウ宇宙風化層の分析に取り組み、鉄の窒化物を発見した. これにより、太陽系外側領域から窒素に富む惑星間塵が、窒素の供給源である可能性を示した [A02-20]. (3) 大場は計画班メンバーの奈良岡と特に協力し、リュウグウサンプル中にウラシル、ナイアシンを発見した一方 [A02-18], 分子雲での光化学反応生成物と考えられるヘキサメチレンテトラミンは検出限界以下であることを明らかにし [A02-6], リュウグウでの熱水反応で消失した可能性を示した. (4) 成島は配向した星間塵と偏光の相互作用で発生する近接場ナノ円偏光で、分子のホモキラリティ発現の可能性を検証するという挑戦的テーマに取り組み、顕微イメージング分析システムの作成に成功した. (5) 林は地球外物質中のサブマイクロスケールの構造中での元素の定量分析をめざした TES 検出器の開発に取り組み、低エネルギー帯域での検出効率の向上、吸収体の大型化、素子のアレイ化によって、X 線計数率を向上させた.

研究項目 A03 理論班：気相・固相の反応素過程に基づく中間温度における化学進化モデル

(1) 理論班はマイクロチームとマクロチームからなる。マイクロチームは量子化学計算によって星・惑星系形成領域に対応する温度・密度環境下での化学反応メカニズムや速度係数、分岐比などを明らかにすることを目的とする。マクロチームはマイクロチームの研究もふまえて星・惑星系形成領域で起こり得るさまざまな反応を取り込んだ反応系の数値モデルを構築し、星・惑星系形成過程の流体計算と反応ネットワークモデルを組み合わせて分子進化を解明することを目指す。中間評価までにマイクロチームは、機械学習による反応ポテンシャル曲面の決定やリングポリマー分子動力学を用いた化学反応計算の手法開発を行い、水クラスターなどを含む複数の反応について速度係数を得た。マクロチームは原始惑星系円盤での元素組成の不均一化や同位体分別過程を明らかにするとともに、観測班と連携して原始星への降着流の定量的モデルを構築した。

(2) ミクロチームは、機械学習を応用したポテンシャルエネルギー曲面の作成法を開発し、得られたポテンシャル曲面とリングポリマー分子動力学を用いることで化学反応の速度係数や分岐比を求める手法を確立した。具体的には、反応経路探索法を使うことによって、ポテンシャル曲面上のエネルギーの低い反応経路上の分子構造およびその微分を効率的にサンプリングして初期ポテンシャル曲面を作成し、さらに初期ポテンシャル曲面を改良することで、精度の高いポテンシャル曲面が作成できることが分かった [A03 文献リスト A03-1]。リングポリマー分子動力学は量子経路積分法を発展させた方法で、ゼロ点振動やトンネル効果などの核の量子性を取り込んで実時間ダイナミクスが計算できることが特徴である。いくつかの比較的簡単な化学反応に応用し、他の計算方法の結果や実験結果と比較して、この方法が十分実用に耐えることを検証した [A03-2]。さらにリングポリマー分子動力学をより複雑な分子系、具体的には氷クラスター表面上への水素分子吸着に適用し、吸着確率を計算する際に、核の量子性がどのような役割を担っているかを明らかにすることができた [A03-3, 5] (図 5)。

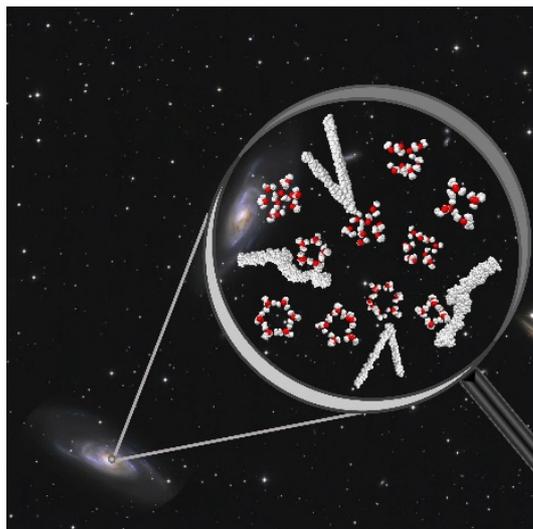


図 5 ChmPhysChem 誌の表紙を飾ったリングポリマー分子動力学論文 (Murakami et al., 2023) [A03-5]

マクロチームは固相表面での化学反応や脱離過程に注目した研究を行った。ダスト表面での化学反応速度は多くの場合表面拡散速度で律速されると考えられている。表面拡散のエネルギー障壁の測定は容易ではないため、従来のモデルでは表面拡散エネルギーと吸着エネルギーの比が吸着種に依らないことが仮定されてきた。固相班と共同で、この仮定が現実的でないことを実験的に示し、表面拡散エネルギーの不定性が反応ネットワークモデルの不定性に与える影響を評価した [A03-7] (図 6)。分子雲は低温にもかかわらず、表面反応で主に生成されかつ昇華温度が高い分子が気相で観測される。これは反応性脱離によると考えられているが、そのメカニズムについては現象論的な議論にとどまっている。我々は総括班メンバーの研究室で行われた $\text{HS} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{S}$ などの反応性脱離の実験を動的モンテカルロ法で模擬し、実験結果との比較から、脱離の確率および反応熱のうち生成分子の並進エネルギーに変換される割合の定量化に成功した [A03-8]。さらにこれと相補的に氷表面での分子動力学計算を用いた並進エネルギー変換率の評価も行った [A03-13]。反応ネットワークモデルを数値的に解くコードについては、関連する論文を反映して更新するとともに、直接コード開発に携わっていない人でも使えるように説明等を整備したセットを用意した。それを用いて、量子化学を専門とする学振研究員が自ら行った量子化学計算結果を反応ネットワークモデルに組み込み、得られた分子存在度を観測値と比較する研究も進めている [A03-12]。

マクロチームは、観測と直接比較できる天体スケールの理論計算も行っている。観測班の成果を含む近年の観測で Streamer と呼ばれる原始星に向かって流れ込む非軸対称な流れがさまざまな空間スケール、分子輝線で見つかっており、これが原始惑星系円盤の角運動量や化学組成を変化させる可能性も議論されている。我々は流体計算を用いて、観測班の得た原始星 TMC1A 周囲の Streamer 画像をもとに、ガス塊の原始星への降着として 3 次元モデルを構築した。観測されるような streamer 構造が現れるのは、落

下するガスの周囲に圧力は同等であるが密度が極めて希薄なガスに覆われ、潮汐力に比べガス抵抗が弱い場合であることも明らかにした [A03-10]. より進化の進んだ原始惑星系円盤については、円盤の鉛直方向のガス・氷ダスト物質輸送および気相・固相化学反応を考慮した円盤化学モデルを開発し、100 万年程度のタイムスケールで円盤ガスは相対的に窒素に富む組成になること、窒素存在量は円盤ガス質量の推定の重要な指標となる可能性があることを示した [A03-9]. また、原始惑星系円盤の光蒸発過程の輻射輸送流体力学シミュレーションを行い、円盤の消失時間とその中心星質量 (光度) 依存性を求めた [A03-14]. これらの結果については、現在理論班代表者の参画している ALMA での原始惑星系円盤ガスサーベイプロジェクト Disk-Exoplanet C/Onnection (DECO) と比較を行っていく.

理論班メンバーおよび研究室所属学生は理論研究をもとに ALMA 等での観測時間を取得し、データ解析や理論モデルとの比較も行った. 近傍の原始惑星系円盤 5 天体のさまざまなガス輝線を 15 au の高空間分解能で均一に観測した大型国際プロジェクト (Molecules with ALMA in Planet-forming Scales (MAPS)) では特に重水素濃縮や電離度に関わる分子種の解析を担当した [A03-15, 16]. 理論モデルとの比較から 2 つの水素同位体交換反応がそれぞれ異なる温度帯で重水素濃縮を駆動していること、円盤中心面電離率は分子雲での値よりもやや低いことなどを明らかにし、プレスリリースも行った. VLA の観測では原始星近傍で昇華する NH₃ および NH₂D を初めて捉えた [A03-17]. 重水素比 (NH₂D/NH₃) は星間氷の水の重水度比よりも有意に高く、水氷が分子雲進化初期に生成されるのに対して、NH₃ 氷は主に低温高密度な分子雲コアで形成されたものと推測される. 以上の研究成果を含めた星形成領域での同位体比分別に関するレビューを Protostars and Planets VII に、原始惑星系円盤の物理構造と化学組成に関するレビューを COMETS III に投稿採択済である. 両者とも 7 年程度に一度出版される分野を代表するレビュー集である.

理論班に関係する第 1 回公募研究は 3 件でいずれも量子化学計算を用いた研究であった. 田地川は中性または電荷をもった H₂O クラスタと CO, O⁻ などとの反応を調べ、HOCO ラジカルや H₂O₂ が生成することを示した. 一部の研究は計画班の高柳氏と共同で行った. 氷表面での荷電粒子の反応は化学反応ネットワークモデルに組み込まれた例が非常に少なく、今後開拓の余地の大きな課題である. Sameera は氷表面での OCS, CH₃OH, CH₃SH と水素原子の反応過程を明らかにした [A03-21, 22, 23]. この研究は表面班メンバーとの共同研究でもある. CH₃OH+H の水素付加・引き抜き反応の結果は 2023 年 5 月末に行われる国際会議 Faraday Discussion の口頭発表に選出された. 堀はアストロケミストリーからアストロバイオロジーにつながる研究を行っている. 多数の異性体を含むアミノ酸前駆体分子の生成エネルギーを計算することで星間空間でのアミノ酸生成反応経路の推定を行った. この論文は理論班の古家との共著論文である [A03-22]. また星間で見つかったキラル分子 *c*-C₃H₆O の光解離の偏光依存性を調べた.

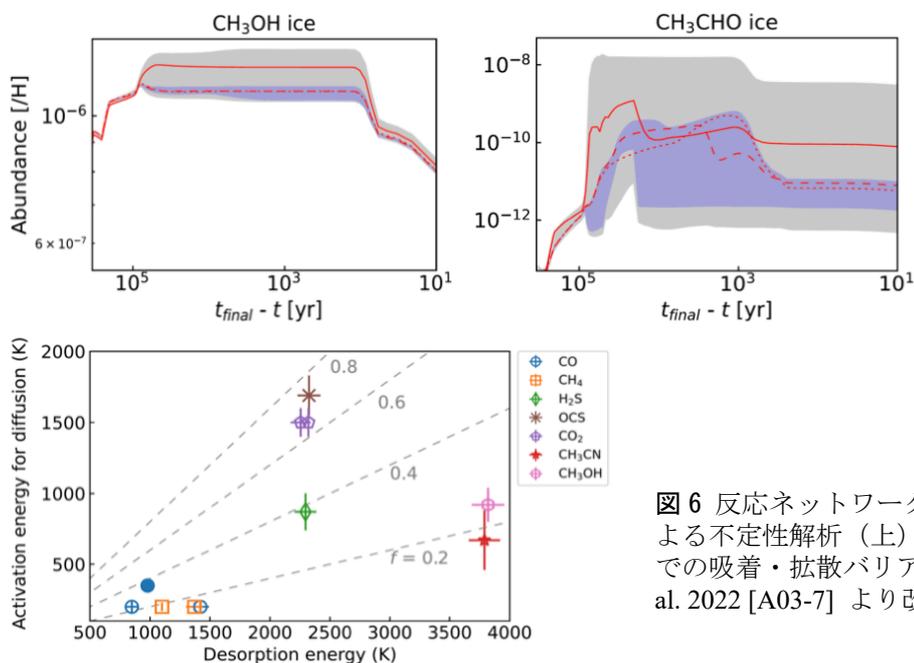


図 6 反応ネットワークモデルによる不定性解析 (上) と固体表面での吸着・拡散バリア (Furuya et al. 2022 [A03-7] より改変).

研究項目 A04 気相実験班：先端ビーム制御による気相化学反応素過程の理解

(1) 気相実験班では中間温度・中間密度で進行する複雑な気相化学について、実験研究による反応素仮定の理解を目指している。班員らの取り組んできた独創的な手法に基づいてこれまでにない実験研究を展開し、A03 理論班と連携して反応速度定数および分岐比の温度依存性を高精度に決定する。領域設定期間内に、いくつかの反応について高精度の反応速度データを取得することで天文観測データに信頼性の高い物理化学的解釈を与えることを目指している。中間評価実施までに、本領域で新たに展開する実験手法の開発とパイロット実験を進めてきた。その中で星間化学における重要なイオン種である H_3^+ に直線型の構造が存在する可能性が明らかとなり、検証を進めている。

(2) 計画班では3つの実験グループが相補的手法を用いて、イオン-中性粒子の反応速度定数の測定に取り組んでいる。合流ビーム実験グループ [中野・椎名 (立教大)] は化学的に活性である中性原子の関与する反応断面積の測定を目的とし、大規模なビーム合流実験設備の開発を行った。現在までに分子イオンおよび中性原子のビーム生成および合流電極の設置が完了し、独自開発したビームモニタを用いて分子イオンビームの2次元像の観測に成功した (図7)。今後 H, D, C, O などの中性原子と分子イオンの合流衝突によって反応実験を実施していく計画である。また、海外共同研究 (Charles 大・プラハ) において分子イオン (N_2^+ , H_3^+) を用いた Afterglow 実験を行い、低温における電子再結合速度定数を決定した [A04 文献リスト A04-5]。並行して、理化学研究所の極低温イオン蓄積リングを用いて N_2O^+ の光解離、および C_2 の光電子脱離の高分解能測定を行った。これらの実験から、星間ガス中の分子の内部状態を推測するうえで重要となる、分子イオンの電子構造および回転定数、およびエネルギー緩和ダイナミクスに関して新たな知見を得ることができた [A04-1, 2, 3, 4]。

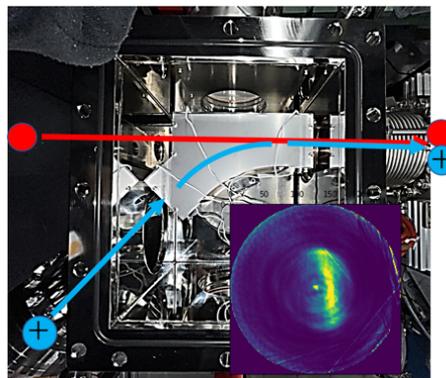


図7 ビーム合流装置および測定したビーム2次元イメージ

イオントラップ実験グループ [岡田 (上智大)・木村 (理研)] では、イオン-極性分子反応のケーススタディとして、 $Ca^+ + CH_3F \rightarrow CaF^+ + CH_3$ 反応速度定数を測定し、極性分子の回転温度依存性の重要性を実験的に初めて明らかにした (図8) [A04-6]。衝突エネルギー約 15 K において、回転温度 300 K (●) と 30 K (■) の場合で反応速度が約 4 倍も異なることが示された。この回転温度冷却効果は CH_3F の回転温度が低いほど捕獲速度定数が大きくなり、結果的に反応速度定数が大きくなった結果であると理解できる。本測定結果はイオン-極性分子反応における極性分子の回転準位分布の重要性を示すものであり、熱平衡状態ではない星間物質の化学進化シミュレーションでは、極性分子の回転準位分布を考慮すべき場合があることを示唆している。今後は、現在開発中のバッファガス冷却イオンと低速極性分子線を組合せた低温イオン-極性分子反応測定法を用いて、より多くの反応系について速度定数の測定を行っていく。

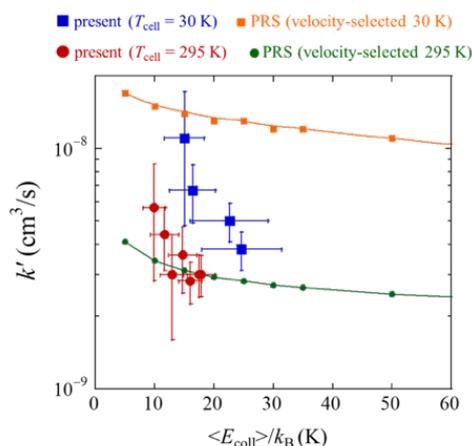


図8 イオントラップ実験で測定された $Ca^+ + CH_3F$ の反応速度

イオン移動管実験グループ [田沼・飯田 (都立大)] では、低温~中間温度における分子イオンと緩衝ガス (H_2 , CH_4 など) の反応について、反応生成物の構造を選別して速度定数を測定することを目的としている。本研究では $H_2^+ + H_2$ 反応系における H_2^+ 分子イオンの移動度を液体窒素温度で測定した。予想されていた H_3^+ に加え、複数の H_2 分子が結合したクラスターイオン H_5^+ , H_7^+ , H_9^+ も観測されることが示された。さらに、 H_3^+ では到着時間スペクトルが2つのピークに分裂し、2つの異なる移動度を示す成分が存在することが判った (図9)。これはよく知られている安定な正三角形に加え、理論的な予想だけが知られている直線構造が生成されている可能性を示唆している。古典力学的計算によって移動度を求めるプログラムを開発し、正三角形より直

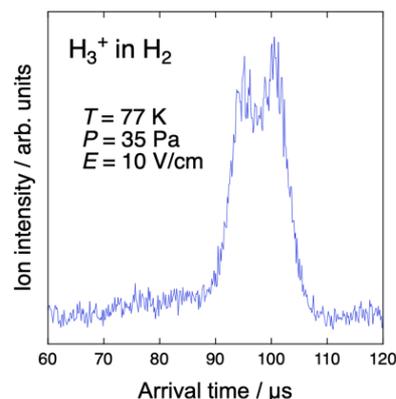


図9 H_3^+ の到着時間スペクトル

線型の方が小さな移動度を示すことを裏付けた。H₃⁺は星間化学において非常に重要な分子であり、直線型が存在するならば、従来の化学進化の理解が変更される可能性もある。当初の研究計画にはなかったが、イオン蓄積リングを用いたより直接的な分光計測について検討を行っている。既に有力な星間分子候補である炭素クラスターイオンや多環芳香族分子イオンに関するレーザー分光計測を行い、エネルギー緩和の経路や速度定数を明らかにした [A04-7, 8, 9, 10]。

また、6件の公募研究(図10)において、以下の成果が得られている。(1)高口(広島大)は分子の量子状態と衝突エネルギーを同時制御した条件下での反応性を測定することを目指し、独自のイオンガイド反応装置の開発に取り組んだ。性能評価として、レーザーで状態制御されたNO⁺イオンと中性炭化水素分子との反応断面積の測定を行い、量子状態依存性を観測することに成功した。

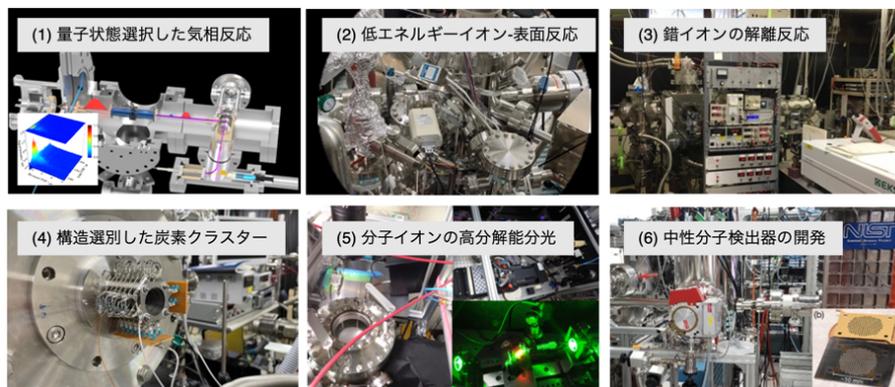


図10 公募研究(1)–(6)で推進する気相化学反応に関する実験研究

(2)中井(理研)は表面実験班との連携のもと、低エネルギーイオンと氷星間塵表面との反応についての実験研究を行なった。C⁺イオン生成のためコンパクトな電子ビーム型イオン源の試作と試験を行なった。結果として、実験条件に適した低エネルギーイオンを得ることは難しく、再検討と計画班との情報交換によりストレージ型イオン源の利用を考え、その中心部分であるイオナイザーを製作した。また、C⁺、DCO⁺、CH₃⁺とH₂O氷やメタノール固体の間の反応について試験的研究を行なった。DCO⁺とH₂O氷、及び、CH₃⁺とメタノール固体との間で低エネルギーイオンが誘起すると思われる反応が示唆された [A04-12]。(3)井口(広島大)は、星間空間においてその存在が予測されているアンモニウムイオンNH₄⁺と芳香族分子との間で形成される錯イオンの衝突誘起解離、光解離を行い、質量分析によりアミノ基NH₂をもつ生成物の有無について検証した。NH₄⁺錯イオンを衝突誘起解離させ高分解能質量分析を行ったところ、アミノ基をもつ解離物の生成が確認された。これは、宇宙空間において芳香族分子とアンモニウムイオンNH₄⁺の間で形成される錯イオンが、芳香族アミノ酸の起源となりうることを示している。(4)大下(東北大)は、炭素-炭素結合が生成する反応を研究するために、炭素クラスター負イオンの構造異性体をイオン移動度質量分析によって分離し、アセチレンとの反応実験を行った。C₁₃、C₁₅では鎖状と環状構造を持つ異性体が共存し、鎖状に比べて環状の方がアセチレンとの反応性が高いことを見出した。(5)水瀬(北里大)はイオン-分子間の高精度ポテンシャルの構築を目的とした新規高分解能分光法を開発している。高解像度イオンイメージング装置と長光路光学系を開発し、分子振動・回転運動の実時間観測に基づく新しいタイプの振動分光・回転分光を達成した。さらに、開発した手法の高い感度を活かし、イオン種に関する予備的な測定を行ったところ、弱いながらイオン種に帰属されるピークが観測され、手法の有用性を示すことができた [A04-16]。(6)奥村(都立大)は超伝導転移端検出器TESを用いた中性分子検出システムの構築に取り組んだ。輻射シールドと赤外線フィルターの導入により、300 K領域が見える条件におけるTES検出器の運転を実現し、中性分子の検出にも世界に先駆けて成功した。中性検出の際の質量分解能については、いまだ検出器の性能を活かしきれておらず、更なる検討が必要であるが、領域内の多くの実験研究において強力なツールとなり得る要素技術として期待される。

以上のように計画研究3グループでは当初計画通り、これまでに反応速度の測定実験が困難であった中性原子、極性分子、構造異性体を対象とした新規実験手法の開発を行なった。並行して既存装置や開発中コンポーネントを利用した実験を行うことで一定の研究成果が得られている。現在、本格稼働にむけてビーム制御系や検出器等の最適化に取り組んでおり、研究期間後半には反応速度の温度依存性に関する精密データの取得が可能となる見込みである。また6件の公募研究では、超伝導検出器、高分解能質量分析、超高速イメージングなど、研究代表者らそれぞれらのもつ多様な実験手法をアストロケミストリー分野へ持ち込むことにより、その裾野が格段に広がった。それぞれの公募研究でも既に研究成果が出始めており、研究期間終了後も本領域と密接に連携していく。

研究項目 A05 表面実験班：単分子表面分光手法を用いた塵表面における反応素過程の分子レベル解明

(1) 表面実験班は主に3つの研究項目(1. 塵モデル表面の作製・評価, 2. 氷形成過程と構造の分子・原子レベル解明, 3. 表面反応素過程の単分子レベル解明)を遂行している。特に, 単一分子・原子レベルでの実空間観測・分光によって, 巨視的な分析手法では分からなかった塵表面での表面反応素過程の詳細を解明し, 宇宙における分子進化の学理の再構築に貢献することを目指している。中間評価実施までに, 各班において装置開発と運用, 試料作製と評価を進めてきた。これまでに星間氷表面の構造の実空間測定, および星間化学に重要な分子の氷表面での拡散のエネルギーバリアを決定することができた。

(2) 各計画班および公募班の成果は以下の通りである。

1. 塵モデル表面の作成・評価と単分子反応の観測・解析 (今田, 金, 数間)

本研究では, 走査プローブ顕微鏡を用いた単一分子・原子レベル分析により, 塵表面における反応素過程を解明することを目的とする。実験には塵表面を模した厳密に規定された表面を準備し, その上で単一分子・原子レベルでの実空間観測・分光を行う。このため, まず本研究に特化したモデル表面を作製するためのパルスレーザー堆積 (PLD) 装置を開発し立ち上げた。チタン酸ストロンチウム (STO) 基板にルテニウム酸ストロンチウム薄膜 (SRO) を堆積し, その構造を X 線回折, 原子間力顕微鏡 (AFM) および走査型トンネル顕微鏡 (STM) を用いて評価した。PLD における各種パラメータに加え, STO 基板の洗浄方法を最適化することで SRO 薄膜の欠陥を減らし, ステップ-テラス構造を得ることができた。カンラン石・輝石群から3種類 (Mg_2SiO_4 , Fe_2SiO_4 , MgSiO_3) の膜を作製したところ, Mg_2SiO_4 と MgSiO_3 はステップ-テラス構造を有し, SRO の表面構造が膜の表面構造にとって重要であることが判明した。今後さらなる最適化を重ね原子レベルに平滑な表面を作製する。STO 基板表面の構造の詳細は解明されていないため, STO 表面についても原子レベルで構造観察を進めており, その結果を PLD の成膜にフィードバックする。また, 対照実験として真空蒸着により製膜した酸化マグネシウム膜を作製し, その上に星間分子を吸着させ, 電子, 光による反応挙動を検討している。今後は SRO の微細な成長条件を調整し, 原子レベルで平坦な表面構造を持つターゲット材料の成膜を目指す。また, 様々な酸化物表面における反応を単節レベルで解析することで, 塵を模した表面における反応素過程を解明し, 包括的な理解を目指す。

2. AFM による表面素過程の観測と解析 (杉本)

結晶氷の基板として用いられてきた Pt(111) や Rh(111) とは全く異なる性質をもつ KCl(001) を基板に用いて, 清浄な KCl(001) 基板を超高真空中で, 水分子のガスに曝露することで, 結晶氷を作製した (図 11)。水吸着時の基板温度を 150 K に保つことで, 結晶化を促して試料作製を行った。結晶氷のバイレイヤーに相当する 0.37 nm の段差が確認できており, 目的としている結晶氷が適切に作製できたことが示された。氷 Ih と氷 Ic の2種類の結晶氷の構造が考えられるが, 螺旋転位の構造を調べることによって, 両者を識別することができた。興味深いことに, 結晶氷の膜厚が薄いときは氷 Ic が得られ, 膜厚が厚いときは氷 Ih が得られた。さらに, KCl(001) 基板上に成長した結晶氷の表面を AFM で高分解能観察した。水分子は一見ランダムに配列しているように観察された。しかし, 自己相関図を作成することにより, 3 回対称な短距離秩序があることが判明した。すなわち, 結晶氷の表面は, 氷内部の 3 回対称性を反映した短距離秩序があるものの, 長距離秩序が失われた少し乱れた構造をとっていることがわかった。この結果は, 過去に我々が金属基板上の結晶氷で確認してきた特徴と同じであり, 少し乱れた構造となることが, 結晶氷の表面の普遍的な姿であるということが明らかとなった。基板によらない結晶氷本来の表面構造の情報が得られたことは, 星間分子雲の氷の研究に影響を与える結果といえる。

以上の研究成果は, 高分解能 AFM でしか得られない成果であり, AFM による結晶氷の研究の正当性が裏付けられた。これらの実験は 80 K の温度で行っているが, 5 K の温度の超高分解能・高力感度な AFM を開発中であり, さらに, 室温での動作テストも済ませており, 残りの期間で 5 K での原子分解能観察を達成できる見込みであり, 氷表面の吸着種の同定と拡散など詳細な局所分析を行う準備が整った。

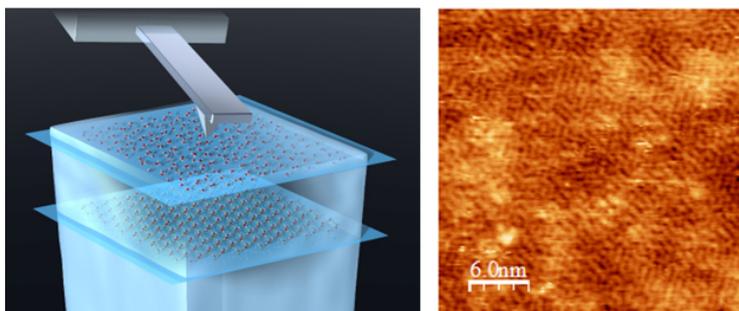


図 11 (左) AFM の模式図。 (右) KCl(001) 上に成長させた氷の AFM 像。

3. TEM による拡散バリアの評価と AFM による氷表面構造の実空間測定 (香内, 日高)

超高真空透過型電子顕微鏡を新たに開発し [A05-9], 星間分子雲および原始惑星系円盤における氷の生成過程を調べることを目的とした. アモルファスケイ酸塩・有機物アモルファスカーボン・アモルファス H₂O 基板を用いて H₂O, CH₄, CH₃OH などの種々の分子の表面拡散の活性化エネルギー測定を研究期間内に行うことを目指し, 中間評価前にすべて完了することができた. そこで, 追加の計画研究として, 原子間力顕微鏡を用いたアモルファス氷の生成温度による構造特性や構造に依存した氷の分極特性の研究を新たに設定し, 研究を開始している. H₂O, CO, CO₂, CH₄, OCS, H₂S, CH₃CN, CH₃OH の表面拡散の活性化エネルギーの値を実験的に決定した [A05-11, 12]. また, この結果から, これまで仮定されてきた分子の吸着エネルギーと拡散の活性化エネルギーの単純な関係性は意味をなさないことが明らかになった. さらに, 種々の分子種からなる氷形状について, これまで仮定されてきたマンツル状ではなく, 多面体結晶構造になること [A05-11, 18], および, 宇宙空間では氷 XIh, XIc, NH₃, NH₃ ハイドレート, CH₃OH などのキラル氷結晶が存在しうることも明らかにした [A05-2, 24].

4. 塵モデル表面の STM による評価 (清水)

星間塵でもよく観測される酸化鉄の一種である磁鉄鉱の役割を検証するため, 地球上鉱物の単結晶試料をモデルシステムとし, 実験を実施した. 熱力学的に最安定な (111) 表面に水や一酸化炭素といったガス分子を真空下で暴露したときの吸着状態と反応挙動を, STM を用いて調べた. 300 K 程度では一酸化炭素の吸着は起こらず, 水分子は解離吸着しヒドロキシとして存在するものと水分子のまま存在するものの二種に帰属できる輝点が観察された. また, 一酸化炭素と水を共吸着させた系においては, 暴露量の増加につれ輝点が消滅, つまり反応が進み脱離が起こったとも解釈できるデータが得られた. さらに, 数種類の吸着物が存在する複雑な像の解釈を進めるため, watershed アルゴリズムを利用した高さ分類プログラムを構築し, 反応中間体と思われる新しい吸着種があることを発見した. 以上の実験と解析技術の開発は, PLD で作製するケイ酸塩表面でのガス吸着の研究においても有用である. また, 星間塵のモデルシステムとしてナノ粒子も模索した. 粒子の凝集を防ぐための有機被膜の除去が課題である一方で, バルクとは異なる電子状態が新しい反応経路を生み出す可能性もあり, 今後検証を進める.

5. 単結晶ケイ酸塩鉱物表面における水素分子と一酸化炭素の吸着・触媒反応過程の解明 (公募研究: 羽馬)

星間物質の観測から得られた吸収線 (ピーク) の強度から物質の存在量を知るには, そのピークの光吸収の強さを表す「吸収断面積」の情報が必要である. 長年の室内実験にて知見が積み重ねられてきたが, 吸収断面積が不明なピークも数多く, その最たるものが氷表面の 水分子の「ダングリグ OH」 (図 12) による 3696 cm⁻¹ (2.7 μm) のピークである. ダングリグ OH は「氷の表面に存在する水素結合ネットワークが不十分な 3 配位の H₂O」 由来し, 氷の表面構造や物性を反映し, さらに氷表面での化学反応において触媒効果をもたらすことが知られている. ダングリグ OH の吸収断面積の測定は, ダングリグ OH の面内振動 (基板に平行な振動) と面外振動 (基板に垂直な振動) の赤外吸収スペクトルを定量的に得る必要があるが, その困難さからダングリグ OH の吸収断面積は未解明であった. そこで赤外吸収分光法と多変量解析とを組み合わせ「赤外多角入射分解分光法」という新しい手法を用いて氷表面のダングリグ OH の吸収断面積を測定した. 試料分子の面内振動と面外振動の赤外吸収スペクトルを定量的に得ることができ, ダングリグ OH の吸収断面積の値は氷内部よりもおよそ 20 倍も小さい値であることがわかり, ダングリグ OH は氷内部の H₂O に比べて特異的な赤外光吸収特性を持つことが明らかになった [A05-23]. 本成果により, 今後, ジェイムズ・ウェッブ宇宙望遠鏡 (JWST) などによりダングリグ OH を観測することで, その柱密度を定量することができ, 宇宙の氷の表面構造についてより詳細に理解することができる.

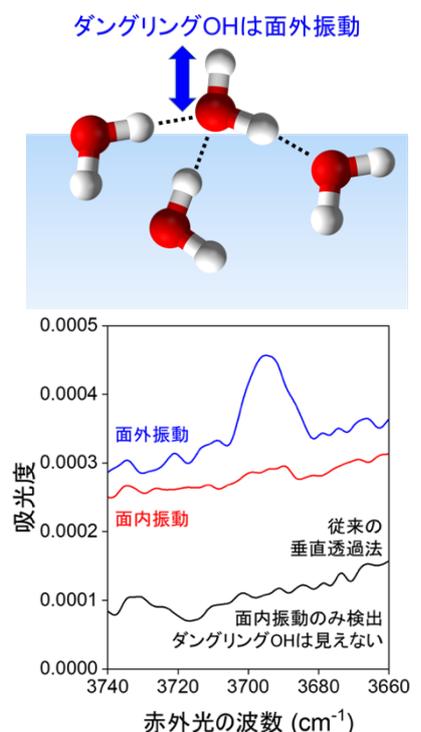


図 12 氷表面における分子配向. 赤外多角入射分解分光法で得た 90 K のアモルファス氷のダングリグ OH の面内振動スペクトルと面外振動スペクトル. 下黒線は垂直透過法で測定したスペクトル.

7 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、主催シンポジウム等の状況。令和5年6月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。なお、雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding author には左に*印を付すこと。

以下に研究計画ごとの研究成果の主要な発表状況を記す。研究計画ごとに班員および公募研究者の色を変えて示す（A01 観測班, A02 分析班, A03 理論班, A04 気相実験班, A05 表面実験班）。記載しきれない成果を含め、すべての論文成果は以下でウェブ公開している (<https://x.gd/n4Znb>)。

【A01 観測班】 査読論文 計 51 報, 国際会議招待講演 計 18 件。主要な成果を以下に記す。

- [1] *Zhang Z. E., Yang Y.-L., Zhang Y., Cox E. G., Zeng S., Murillo N. M., Ohashi S., Sakai N. The Perseus ALMA Chemistry Survey (PEACHES). II. Sulfur-bearing Species and Dust Polarization 5 Revealing Shocked-regions in Protostars in the Perseus Molecular Cloud. *Astrophys. J.* **946**, 113 (2023)
- [2] *Shimonishi T., Tanaka K. E. I., Zhang Y., Furuya K. The Detection of Hot Molecular Cores in the Small Magellanic Cloud. *Astrophys. J. Lett.* **946**, L41 (2023)
- [3] *Wright M., Hirota T., Forbrich J., Plambeck R., Bally J., Goddi C., Ginsburg A., McGuire M. An Ionized Outflow in Orion-KL Source I?. *Astrophys. J.* **945**, 14 (2023)
- [4] *Yang Y.-L., Green J. D., Pontoppidan K. M., Bergner J. B., Cleeves L. I., Evans N. J., Garrod R. T., Jin M., Kim C. H., Kim J., Lee J.-E., Sakai N., Shingledecker C. N., Shope B., Tobin J. J., van Dishoeck E. F. CORINOS. I. JWST/MIRI Spectroscopy and Imaging of a Class 0 Protostar IRAS 15398-3359. *Astrophys. J.* **941**, L13 (2022)
- [5] *Hirota T., Wolak P., Hunter T.R. et al. Millimeter methanol emission in the high-mass young stellar object G24.33+0.14. *Pub. Astron. Soc. Japan* **74**, 1234-1262 (2022)
- [6] *Okoda Y., Oya Y., Imai M., Sakai N., Watanabe Y., López-Sepulcre A., Saigo K., Yamamoto S. Chemical Differentiation and Temperature Distribution on a Few au Scale around the Protostellar Source B335. *Astrophys. J.* **935**, 136 (2022)
- [7] *Imai M., Oya Y., Sakai N. (73 人中 11 番目), Aikawa Y. (12 番目), Hama T. (32 番目), Hanawa T. (33 番目), Hirota T. (36 番目), Oba Y. (54 番目), Sakai T. (62 番目), Watanabe N. (68 番目), Watanabe Y. (69 番目), Yamamoto S. (73 番目) et al. Chemical and Physical Characterization of the Isolated Protostellar Source CB68: FAUST IV. *Astrophys. J.* **934**, 70 (2022)
- [8] *Hanawa T., Sakai N., Yamamoto S. Cloudlet Capture Model for Asymmetric Molecular Emission Lines Observed in TMC-1A with ALMA. *Astrophys. J.* **932**, 122 (2022)
- [9] Ohno Y., *Oyama T., Tamanai A., Zeng S., Watanabe Y., Nakatani R., Sakai T., *Sakai N. Laboratory Measurement of Millimeter-wave Transitions of $^{13}\text{CH}_2\text{DOH}$ for Astronomical Use. *Astrophys. J.* **932**, 101 (2022)
- [10] *Bouvier M., Ceccarelli C., López-Sepulcre A., Sakai N., Yamamoto S., Yang Y.-L. The Chemical Nature of Orion Protostars: Are ORANGES Different from PEACHES? ORANGES II. *Astrophys. J.* **929**, 10 (2022)
- [11] *Hsu S.-Y., Yang Y.-L. (28 人中 9 番目) et al. ALMA Survey of Orion Planck Galactic Cold Clumps (ALMASOP): A Hot Corino Survey toward Protostellar Cores in the Orion Cloud. *Astrophys. J.* **927**, 218 (2022)
- [12] *Sakai T., Furuya K. (17 人中 3 番目), Aikawa Y. (6 番目), Hirota T. (13 番目), Sakai N. (16 番目), Yamamoto S. (17 番目) et al. The ALMA Survey of 70 μm Dark High-mass Clumps in Early Stages (ASHES). V. Deuterated Molecules in the 70 μm Dark IRDC G14.492-00.139. *Astrophys. J.* **925**, 144 (2022)
- [13] *Shimonishi T., Izumi N., Furuya K., Yasui C. The Detection of a Hot Molecular Core in the Extreme Outer Galaxy. *Astrophys. J.* **922**, 206 (2021)
- [14] *Codella C., Ceccarelli C., Chandler C., Sakai N., Yamamoto S., FAUST Team. Enlightening the chemistry of infalling envelopes and accretion disks around Sun-like protostars: the ALMA FAUST project. *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* **8**, 227 (2021)
- [15] *Shibayama Y., Watanabe Y., Oya Y., Sakai N., Lopez-Sepulcre A., Liu S.-Y., Su Y.-N., Zhang Y., Sakai T., Hirota T., *Yamamoto S. Exploring the 100 au Scale Structure of the Protobinary System NGC 2264 CMM3 with ALMA. *Astrophys. J.* **918**, 32 (2021)
- [16] *Bouvier M., López-Sepulcre A., Ceccarelli C., Sakai N., Yamamoto S., Yang Y.-L. ORion Alma New GEneration Survey (ORANGES). I. Dust continuum and free-free emission of OMC-2/3 filament protostars. *Astron. Astrophys.* **653**, A117 (2021)
- [17] *Watanabe Y., Chiba Y., Sakai T., Tamanai A., Suzuki R., Sakai N. Spectrometer Using superconductor Mixture Receiver (SUMIRE) for laboratory submillimeter spectroscopy. *Pub. Astron. Soc. Japan* **73**, 372-393 (2021)
- [18] *Yang Y.-L., Sakai N., Zhang Y., Murillo N. M., Zhang Z. E., Higuchi A. E., Zeng S., López-Sepulcre A.,

- [Yamamoto S.](#), Lefloch B., Bouvier M., Ceccarelli C., [Hirota T.](#), Imai M., [Oya Y.](#), [Sakai T.](#), [Watanabe Y.](#) The Perseus ALMA Chemistry Survey (PEACHES). I. The Complex Organic Molecules in Perseus Embedded Protostars. *Astrophys. J.* **910**, 20 (2021)
- [19] *[Iino T.](#), Taniguchi K., Sagawa H., Tsukagoshi T. ¹³C Isotopic Ratios of HC₃N on Titan Measured with ALMA. *Planet. Sci. J.* **2**, 166 (2021)
- [20] *Nomura H., [Furuya K.](#), Cordiner M. A., Charnley S. B., Alexander C. M. O'D., Nixon C. A., Guzman V. V., [Yurimoto H.](#), Tsukagoshi T., [Iino T.](#) The Isotopic Links from Planet Forming Regions to the Solar System. In *Protostars and Planets VII*, in press.
- 【A02 分析班】** 査読論文 計 113 報, 国際会議招待講演 計 25 件, 国際会議特別セッション開催 2 件. 国際シンポジウム *Solar System symposium in Sapporo 2023* (2023.2.14–16) 開催. 主要な成果を以下に記す.
- [1] *Hashiguchi M., [Naraoka H.](#) (54 人中 4 番目), [Oba Y.](#) (21 番目), [Yurimoto H.](#) (34 番目), [Noguchi T.](#) (35 番目), [Okazaki R.](#) (36 番目), [Yabuta H.](#) (38 番目), [Tachibana S.](#) (40 番目) et al. The spatial distribution of soluble organic matter and their relationship to minerals in the asteroid (162173) Ryugu. *Earth Planets Space* **75**, 73 (2023)
- [2] *Piani L., [Naraoka H.](#) (88 人中 69 番目), [Okazaki R.](#) (70 番目), [Yabuta H.](#) (72 番目), [Tachibana S.](#) (87 番目), [Yurimoto H.](#) (88 番目) et al. Hydrogen isotopic composition of hydrous minerals in asteroid Ryugu. *Astrophys. J. Lett.* **946**, L43 (11pp) (2023)
- [3] *Viennet J.-C., [Yurimoto H.](#) (33 人中 12 番目), [Noguchi T.](#) (13 番目), [Okazaki R.](#) (14 番目), [Yabuta H.](#) (15 番目), [Naraoka H.](#) (16 番目), [Tachibana S.](#) (18 番目) et al. Interaction between clay minerals and organics in asteroid Ryugu. *Geochim. Persp. Lett.* **25**, 8–12 (2023)
- [4] *Dartois E., [Yabuta H.](#) (63 人中 3 番目), [Matsumoto M.](#) (21 番目), [Noguchi T.](#) (42 番目), [Naraoka H.](#) (43 番目), [Okazaki R.](#) (44 番目), [Yurimoto H.](#) (46 番目), [Tachibana S.](#) (55 番目) et al. Chemical composition of carbonaceous asteroid Ryugu from synchrotron spectroscopy in the mid- to far-infrared of Hayabusa2-returned samples. *Astron. Astrophys.* **671**, A2 (2023).
- [5] *Aponte J. C., [Naraoka H.](#) (7 番目), [Okazaki R.](#) (8 番目), [Tachibana S.](#) (10 番目), [Yurimoto H.](#) (14 番目), [Yabuta H.](#) (16 番目), [Noguchi T.](#) (18 番目), The Hayabusa2-initial-analysis SOM team and The Hayabusa2-initial-analysis core team. PAHs, hydrocarbons, and dimethylsulfides in Asteroid Ryugu samples A0106 and C0107 and the Orgueil (C11) meteorite. *Earth Planets Space* **75**, 28 (2023)
- [6] *Parker E. T., [Naraoka H.](#) (30 人中 7 番目), [Tachibana S.](#) (9 番目), [Yabuta H.](#) (10 番目), [Yurimoto H.](#) (11 番目), [Noguchi T.](#) (27 番目), [Okazaki R.](#) (28 番目) et al. Extraterrestrial amino acids and amines identified in asteroid Ryugu samples returned by the Hayabusa2 mission. *Geochim. Cosmochim. Acta* **347**, 42–57. (2023)
- [7] *[Yabuta H.](#), [Matsumoto M.](#) (130 人中 36 番目), [Noguchi T.](#) (38 番目), [Yurimoto H.](#) (39 番目), [Okazaki R.](#) (41 番目), [Naraoka H.](#) (42 番目), [Hayashi T.](#) (61 番目), [Tachibana S.](#) (128 番目) et al. Macromolecular organic matter in samples of the asteroid (162173) Ryugu. *Science*, eabn9057 (2023)
- [8] *[Naraoka H.](#), [Oba Y.](#) (115 人中 4 番目), [Yurimoto H.](#) (34 番目), [Noguchi T.](#) (36 番目), [Okazaki R.](#) (37 番目), [Yabuta H.](#) (38 番目), [Tachibana S.](#) (40 番目), [Hayashi T.](#) (57 番目) et al. Soluble organic molecules in samples of the carbonaceous asteroid (162173) Ryugu. *Science*, eabn9033 (2023)
- [9] *Broadley M., [Okazaki R.](#) (64 人中 6 番目), [Tachibana S.](#) (9 番目), [Yurimoto H.](#) (12 番目), [Noguchi T.](#) (14 番目), [Naraoka H.](#) (15 番目), [Yabuta H.](#) (16 番目) et al. The noble gas and nitrogen relationship between Ryugu and carbonaceous chondrites. *Geochim. Cosmochim. Acta* **345**, 62–73 (2023)
- [10] Nakato A., [Okazaki R.](#) (17 人中 15 番目), *[Tachibana S.](#) (17 番目) et al. Ryugu particles found outside the Hayabusa2 sample container. *Geochim. J.* **56**, 197–222 (2022)
- [11] *[Okazaki R.](#), [Naraoka H.](#) (123 人中 44 番目), [Noguchi T.](#) (45 番目), [Yabuta H.](#) (46 番目), [Yurimoto H.](#) (47 番目), [Tachibana S.](#) (48 番目), [Hayashi T.](#) (109 番目) et al. Noble gases and nitrogen in samples of asteroid Ryugu record its volatile sources and recent surface evolution. *Science*, eabo431 (2022)
- [12] *[Okazaki R.](#), [Naraoka H.](#) (123 人中 46 番目), [Noguchi T.](#) (47 番目), [Yabuta H.](#) (48 番目), [Yurimoto H.](#) (49 番目), [Tachibana S.](#) (123 番目) et al. First asteroid gas sample delivered by the Hayabusa2 mission: A treasure box from Ryugu. *Science Adv.* **8**, eabo7239 (2022)
- [13] *Hopp T., [Naraoka H.](#) (92 人中 72 番目), [Noguchi T.](#) (73 番目), [Okazaki R.](#) (74 番目), [Yabuta H.](#) (76 番目), [Tachibana S.](#) (91 番目), [Yurimoto H.](#) (92 番目) et al. Ryugu's nucleosynthetic heritage from the outskirts of the Solar System. *Science Adv.* **8**, eadd8141 (2022)
- [14] *Nakamura T., [Matsumoto M.](#) (220 人中 2 番目), [Noguchi T.](#) (66 番目), [Takigawa A.](#) (90 番目), [Matsumoto T.](#) (142 番目), [Yurimoto H.](#) (147 番目), [Okazaki R.](#) (148 番目), [Yabuta H.](#) (149 番目), [Naraoka H.](#) (150 番目), [Tachibana S.](#) (152 番目), [Hayashi T.](#) (210 番目) et al. Formation and evolution of carbonaceous asteroid Ryugu: Direct evidence from returned samples. *Science* eabn8671 (2022)
- [15] Yokoyama T., [Naraoka H.](#) (149 人中 72 番目), [Noguchi T.](#) (73 番目), [Okazaki R.](#) (74 番目), [Yabuta H.](#) (76 番目), [Hayashi T.](#) (136 番目), [Tachibana S.](#) (148 番目), *[Yurimoto H.](#) (149 番目) et al. Samples returned from the asteroid Ryugu are similar to Ivuna-type carbonaceous meteorites. *Science* (2022)

- [16] *Yada T., [Hayashi T.](#) (103 人中 18 番目), [Tachibana S.](#) (34 番目), [Okazaki R.](#) (36 番目), [Yurimoto H.](#) (48 番目), [Noguchi T.](#) (50 番目), [Yabuta H.](#) (51 番目), [Naraoka H.](#) (52 番目) et al. Preliminary analysis of the Hayabusa2 samples returned from C-type asteroid Ryugu. *Nature Astron.* **6**, 214-220. (2022)
- [17] *[Tachibana S.](#), [Okazaki R.](#) (109 人中 3 番目), [Yurimoto H.](#) (14 番目), [Noguchi T.](#) (16 番目), [Yabuta H.](#) (17 番目), [Naraoka H.](#) (18 番目) et al. Pebbles and sand on asteroid (162173) Ryugu: In situ observation and particles returned to Earth. *Science* **375**, 1011-1016. (2022)
- [18] *[Oba Y.](#), [Naraoka H.](#) (32 人中 10 番目), [Tachibana S.](#) (11 番目), [Yurimoto H.](#) (12 番目), [Noguchi T.](#) (14 番目), [Okazaki R.](#) (15 番目), [Yabuta H.](#) (16 番目) and Hayabusa2-initial-analysis SOM team. Uracil in the carbonaceous asteroid (162173) Ryugu. *Nature Commun.* **14**, 1992 (2023)
- [19] *[Noguchi T.](#), [Matsumoto T.](#) (138 人中 2 番目), [Takigawa A.](#) (52 番目), [Matsumoto M.](#) (55 番目), [Hayashi T.](#) (114 番目), [Yurimoto H.](#) (128 番目), [Okazaki R.](#) (132 番目), [Yabuta H.](#) (133 番目), [Naraoka H.](#) (134 番目), [Tachibana S.](#) (136 番目) et al. A dehydrated space-weathered skin cloaking the hydrated interior of Ryugu. *Nature Astron.* **7**, 170-181 (2023)
- [20] *[Matsumoto T.](#), [Noguchi T.](#) (77 人中 2 番目), [Takigawa A.](#) (12 番目), [Tachibana S.](#) (14 番目), [Matsumoto M.](#) (16 番目), [Yurimoto H.](#) (58 番目), [Okazaki R.](#) (59 番目), [Yabuta H.](#) (60 番目), [Naraoka H.](#) (61 番目) et al. Formation of iron nitride on Ryugu indicating possible influx of outer Solar System materials. *Nature Astron.*, in press.
- 【A03 理論班】** 査読論文 計 49 報, 国際会議招待講演 計 4 件. 主要な成果を以下に記す.
- [1] *[Takayanagi T.](#) Application of Reaction Path Search Calculations to Potential Energy Surface Fits. *J. Phys. Chem. A* **125**, 3994-4002. (2021)
- [2] Saito K., Hashimoto Y., *[Takayanagi T.](#) Ring-polymer molecular dynamics calculations of thermal rate coefficients and branching ratios for the interstellar $\text{H}_3^+ + \text{CO} \rightarrow \text{H}_2 + \text{HCO}^+/\text{HOC}^+$ reaction and its deuterated analog. *J. Phys. Chem. A* **125**, 10750-10756. (2021)
- [3] Suzuki H., Otomo T., Ogino K., Hashimoto Y., *[Takayanagi T.](#) Nuclear Quantum Effects in H_2 Adsorption Dynamics on a Small Water Cluster Studied with Ring-Polymer Molecular Dynamics Simulations. *ACS Earth Space Chem.* **6**, 1390-1396. (2022)
- [4] *Murakami T., *[Takayanagi T.](#) Interstellar benzene formation mechanisms via acetylene cyclotrimerization catalyzed by Fe^+ attached to water ice clusters: quantum chemistry calculation study. *Molecules* **27**, 7767. (2022)
- [5] *Murakami T., Ogino K., Hashimoto Y., *[Takayanagi T.](#) Ring-polymer molecular dynamics simulation for the adsorption of H_2 on ice clusters $(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=8, 10, \text{ and } 12$). *Chem. Phys. Chem.*, e202200. (2023)
- [6] Miyazaki A., [Tsuge M.](#), [Hidaka H.](#), [Nakai Y.](#), *[Watanabe N.](#) Direct Determination of the Activation Energy for Diffusion of OH Radicals on Water Ice. *Astrophys. J. Lett.* **940**, L2, 7pp. (2022)
- [7] *[Furuya K.](#), [Hama T.](#), [Oba Y.](#), [Kouchi A.](#), [Watanabe N.](#), [Aikawa Y.](#) Diffusion Activation Energy and Desorption Activation Energy for Astrochemically Relevant Species on Water Ice Show No Clear Relation. *Astrophys. J. Lett.* **933**, L16. (2022)
- [8] *[Furuya K.](#), [Oba Y.](#), [Shimonishi T.](#) Quantifying the Chemical Desorption of H_2S and PH_3 from Amorphous Water-ice Surfaces. *Astrophys. J.* **926**, 171. (2022)
- [9] *[Furuya K.](#), Seokho Lee., Nomura H. Different Degrees of Nitrogen and Carbon Depletion in the Warm Molecular Layers of Protoplanetary Disks. *Astrophys. J.* **938**, 29. (2022)
- [10] *[Hanawa T.](#), [Sakai N.](#), [Yamamoto S.](#) Cloudlet Capture Model for Asymmetric Molecular Emission Lines Observed in TMC1A with ALMA. *Astrophys. J.* **932**, 122 (14pp). (2022)
- [11] *[Aikawa Y.](#), Okuzumi S., Pontoppidan K. The physical and chemical processes in protoplanetary disks: constraints on the composition of comets. In *COMETS III*, in press. (2023)
- [12] *Molpeceres G., Rivilla V. M., [Furuya K.](#), Kästner J., Maté B., [Aikawa Y.](#) Processing of hydroxylamine, NH_2OH , an important prebiotic precursor, on interstellar ices. *Mon. Not. Royal Astron. Soc.* **521**, 4, 6061-6074. (2023)
- [13] *Molpeceres G., Zaverkin V., [Furuya K.](#), [Aikawa Y.](#), Kästner J. Reaction dynamics on amorphous solid water surfaces using interatomic machine-learned potentials. Microscopic energy partition revealed from the $\text{P} + \text{H} \rightarrow \text{PH}$ reaction. *Astron. Astrophys.* **673**, A51, 13 pp. (2023)
- [14] *Komaki A., Nakatani R., [Yoshida N.](#) Radiation Hydrodynamics Simulations of Protoplanetary Disks: Stellar Mass Dependence of the Disk Photoevaporation Rate. *Astrophys. J.* **910**, 51. (2021)
- [15] *[Aikawa Y.](#), Cataldi G., Yamato Y. et al. Molecules with ALMA at planet-forming scales (MAPS). XIII. HCO^+ and disk ionization structure. *Astrophys. J. Supp.* **257**, 13. (2021)
- [16] *Cataldi G., Yamato Y., [Aikawa Y.](#) (29 人中 3 番目) et al. Molecules with ALMA at Planet-forming Scales (MAPS). X. Studying deuteration at high angular resolution toward protoplanetary disks. *Astrophys. J. Supp.* **257**, 10. (2021)
- [17] *Yamato Y., [Furuya K.](#), [Aikawa Y.](#), Persson M.V., Tobin J.J., Jørgensen J.K., Kama M. The First Interferometric Measurements of $\text{NH}_2\text{D}/\text{NH}_3$ Ratio in Hot Corinos. *Astrophys. J.* **941**, 75. (2023)

- [18] *Tobin J. J., van't Hoff M. L. R., Leemker M., van Dishoeck E. F., Paneque-Carreno T., [Furuya K.](#), Harsono D., Persson M. V., Cleaves L. I., Sheehan P. D., Cieza L. Deuterium-enriched water ties planet-forming disks to comets and protostars. *Nature* **615**, 227-230. (2023)
- [19] *[Tachikawa H.](#) Reactions of Photoionization-Induced CO-H₂O Cluster: Direct Ab Initio Molecular Dynamics Study. *ACS Omega* **6**, 16688-16695. (2021)
- [20] *[Tachikawa H.](#) Formation of Hydrogen Peroxide from O⁻(H₂O)_n Clusters. *J. Phys. Chem. A* **125**, 4598-4605. (2021)
- [21] *Shoji M., [Watanabe N.](#), [Hori Y.](#), [Furuya K.](#), Umemura M., Boero M., Shigeta Y. Comprehensive Search of Stable Isomers of Alanine and Alanine Precursors in Prebiotic Syntheses. *Astrobiology* **22**, 1129-1142. (2022)
- [22] *[Hori Y.](#), Nakamura H., Sakawa T., [Watanabe N.](#), Kayanuma M., Shoji M., Umemura M., *Shigeta Y. Theoretical Investigation into a Possibility of Formation of Propylene Oxide Homochirality in Space. *Astrobiology* **22**, 1330, 1336 (2022)
- [23] *Nguyen T., [Oba Y.](#), [Sameera W. M. C.](#), [Kouchi A.](#), [Watanabe N.](#) Successive H-atom Addition to Solid OCS on Compact Amorphous Solid Water. *Astrophys. J.* **922**, 146, 13pp. (2021)
- [24] *[Sameera W. M. C.](#), Jayaweera A.P., Ishibashi A., [Hidaka H.](#), [Oba Y.](#), [Watanabe N.](#) A systematic mechanistic survey on the reactions between OH radical and CH₃OH on ice. *Faraday Discuss.* (2023)
- [25] Nguyen T., *[Oba Y.](#), [Sameera W.M.C.](#), [Furuya K.](#), [Kouchi A.](#), [Watanabe N.](#) Surface reaction of methyl mercaptan (CH₃SH) with hydrogen atoms on amorphous solid water. *Astrophys. J.* **944**, 219. (2023)

【A04 気相実験班】 査読論文 計 53 報, 国際会議招待講演 計 3 件. 主要な成果を以下に記す.

- [1] *Iizawa M., [Kimura N.](#) (7人中3番目), [Nakano Y.](#) (7番目) et al. Photodetachment Spectroscopy of Highly Excited C₂⁻ and Their Temporal Evolution in the Ion Storage Ring RICE. *J. Phys. Soc. Jpn.* **91**, 084302 (2022)
- [2] Igosawa R., *Kuma S., [Kimura N.](#) (10人中3番目), [Nakano Y.](#) (9番目) et al. Photodissociation spectroscopy of N₂O⁺ in the ion storage ring RICE. *Chem. Phys.* **153**, 184305 (2020)
- [3] Hirota A., *[Kimura N.](#) (10人中3番目), [Nakano Y.](#) (9番目) et al. Radiative cooling dynamics of isolated N₂O⁺ ions in a cryogenic electrostatic ion storage ring. *Phys. Rev. A* **102**, 023119 (2020)
- [4] *[中野祐司](#), 榎本嘉範, 東俊行. 極低温静電型イオン蓄積リングの開発と冷却分子イオンの物理. 日本物理学会誌 解説 **77**, 346 (2022)
- [5] *Saito S., [Nakano Y.](#) (7人中2番目) et al. State Selective Recombination of H₃⁺ Ions at Low Temperatures: Kinetic Modelling and Experimental Study on Plasma Deexcitation. *WDS'22 Proceedings of Contributed Papers – Physics*, 9–15. (2022)
- [6] *[Okada K.](#), Sakimoto K., Schuessler H. A. Rotational Cooling Effect on the Rate Constant in the CH₃F + Ca⁺ Reaction at Low Collision Energies. *J. Phys. Chem. A* **126**, 4881-4890. (2022)
- [7] [Iida S.](#), [Tanuma H.](#) (9人中6番目), *Hansen K. et al. Thermal radiative cooling of carbon cluster cations C_N⁺, N = 9, 11, 12, 17-27. *Mon. Not. Royal Astron. Soc.* **514**, 844. (2022)
- [8] [Iida S.](#), [Tanuma H.](#) (9人中6番目), *Azuma T. et al. IR-photon quenching of delayed electron detachment from hot pentacene anions. *Phys. Rev. A* **104**, 043114. (2021)
- [9] *[Iida S.](#), Kuma S., [Tanuma H.](#), Azuma T., Shiromaru H. State-selective observation of radiative cooling of vibrationally excited C₂⁻. *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 10526. (2020)
- [10] *[Iida S.](#), [Tanuma H.](#) (9人中5番目) et al. Rotationally resolved excitation spectra measured by slow electron detachment from Si₂⁻. *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 5199. (2020)
- [11] Yoshiki A., [Kohguchi H.](#) (6人中5番目), *Yamasaki K. et al. Rate coefficients for the CH(X²Π) + CHX₃ (X = Cl and Br) reactions and the propensity of the reactions of CH with halomethanes. *Chem. Phys. Lett.* **804**, 139879. (2022)
- [12] *[Nakai Y.](#), [Sameera W. M. C.](#), [Furuya K.](#), [Hidaka H.](#), Ishibashi A., [Watanabe N.](#) Methanol Formation through Reaction of Low-energy CH₃⁺ Ions with an Amorphous Solid Water Surface at Low Temperature. *Astrophys. J.* in press. (2023)
- [13] Miyazaki A., [Tsuge M.](#), [Hidaka H.](#), [Nakai Y.](#), *[Watanabe N.](#) Direct Determination of the Activation Energy for Diffusion of OH Radicals on Water Ice. *Astrophys. J. Lett.*, **940**, L2. (2022)
- [14] Goda R., Kanazawa S., Machida S., Muramatsu S., *[Inokuchi Y.](#) Conformation of Benzo-12-Crown-4 Complexes with Ammonium Ions Investigated by Cold Gas-Phase Spectroscopy. *J. Phys. Chem. A* **125**, 10410–10418. (2021)
- [15] Nagata T., W.J. Wu J., Nakano M., [Ohshimo K.](#), *Misaizu F. Geometrical Structures of Gas Phase Cerium Oxide Cluster Cations after Reaction with Nitric Oxide Studied by Ion Mobility Mass Spectrometry. *J. Phys. Chem. A* **126**(7), 1204-1210. (2022)
- [16] Ikeda D., *[Mizuse K.](#), Ohshima Y. Direct imaging of the hyperfine depolarization in electronically excited NO molecules. *Phys. Rev. A* **107**, 043116. (2023)
- [17] *[Okumura T.](#) et al. (他 41 名). Proof-of-Principle Experiment for Testing Strong-Field Quantum Electrodynamics

with Exotic Atoms: High Precision X-Ray Spectroscopy of Muonic Neon. *Phys. Rev. Lett.* **130**, 173001. (2023)

【A05 表面実験班】 査読論文 計 38 報, 国際会議招待講演 計 10 件. 主要な成果を以下に記す.

- [1] Adachi Y., *[Sugimoto Y.](#) (6 人中 6 番目) et al. Atomic arrangement of Si adatom on the Silicene/Ag(111) surface. *Appl. Surf. Sci.* **630**, 157336. (2023)
- [2] *Nguyen T., [Oba Y.](#), [Sameera W. M. C.](#), [Furuya K.](#), [Kouchi A.](#), [Watanabe N.](#) Surface Reaction of Methyl Mercaptan (CH₃SH) with Hydrogen Atoms on Amorphous Solid Water. *Astrophys. J.* **944**, 219(14pp). (2023)
- [3] *[Imada H.](#), Imai-Imada M., Ouyang X., Muranaka A., *[Kim Y.](#) Anti-Kasha emissions of single molecules in a plasmonic nanocavity. *J. Chem. Phys.* **157**, 104302. (2022)
- [4] Imai-Imada M., *[Imada H.](#), Miwa K., Tanaka Y., Kimura K., Zoh I., Jaculbia R. B., Yoshino H., Muranaka A., Uchiyama M., *[Kim Y.](#) Orbital-resolved visualization of single-molecule photocurrent channels. *Nature* **603**, 829-834. (2022)
- [5] *Ohtomo M., [Sugimoto Y.](#) (12 人中 10 番目), *Sato S. et al. On-surface synthesis of hydroxy-functionalized graphene nanoribbons through deprotection of methylenedioxy groups. *Nanoscale Adv.* **4**, 4871-4879. (2022)
- [6] Kimura M., *[Sugimoto Y.](#) Lattice distortion of oxygen monolayer on Ag(111) observed by scanning probe microscopy. *Phys. Rev. B* **106**, 115432, 1-6. (2022)
- [7] *[Sugimoto Y.](#) Seeing how ice breaks the rule. *Science* **377**, 264-265. (2022)
- [8] Zhang C., [Kazuma E.](#), *[Kim Y.](#) Steering the reaction pathways of terminal alkynes by introducing oxygen species: From C–C coupling to C–H activation. *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 10282-10290. (2022)
- [9] *Lee S. R., *[Kim Y.](#) (8 人中 8 番目) et al. Amorphous to polycrystalline phase transition in La₂O₃ films grown on a Silicon substrate forming Si-doped La₂O₃ films. *Phys. Status Solidi A* **219**, 2200318. (2022)
- [10] *[Kouchi A.](#), [Shimonishi T.](#) (12 人中 2 番目), [Furuya K.](#) (6 番目), [Watanabe N.](#) (11 番目) et al. Chiral Ice Crystals in Space. *Intech Open* (2022)
- [11] *[Furuya K.](#), [Hama T.](#), [Oba Y.](#), [Kouchi A.](#), [Watanabe N.](#), [Aikawa Y.](#) Diffusion Activation Energy and Desorption Activation Energy for Astrochemically Relevant Species on Water Ice show No Clear Relation. *Astrophys. J. Lett.* **933**, L16. (2022)
- [12] *Tsuge M., [Kouchi A.](#), [Watanabe N.](#) Penetration of Nonenergetic Hydrogen Atoms into Amorphous Solid Water and their Reaction with Embedded Benzene and Naphthalene. *Astrophys. J.* **933**, 138(9pp). (2022).
- [13] Zoh I., Imai-Imada M., Bae J., [Imada H.](#), Tsuchiya Y., Adachi C., *[Kim Y.](#) Visualization of frontier molecular orbital separation of a single thermally activated delayed fluorescence emitter by STM. *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 7512-7518. (2021)
- [14] *[Imada H.](#), Imai-Imada M., Miwa K., Yamane H., Iwasa T., Tanaka Y., Toriumi N., Kimura K., Yokoshi N., Muranaka A., Uchiyama M., Taketsugu T., Kato Y. K., Ishihara H., *[Kim Y.](#) Single-molecule laser nanospectroscopy with micro-electron volt energy resolution. *Science* **373**, 95-98. (2021)
- [15] Onoda J., Hasegawa T., *[Sugimoto Y.](#) In Situ Reproducible Sharp Tips for Atomic Force Microscopy. *Phys. Rev. Appl.* **15**, 034079, 1-8. (2021)
- [16] *[Kouchi A.](#), [Furuya K.](#) (13 人中 12 番目), [Watanabe N.](#) (13 番目) et al. Formation of chiral CO polyhedral crystals on icy interstellar grains. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **505**, 1530-1542. (2021)
- [17] *[Kouchi A.](#), [Hidaka H.](#) (13 人中 5 番目), [Watanabe N.](#) (13 番目) et al. UV-Induced Formation of Ice XI Observed Using an Ultra-High Vacuum Cryogenic Transmission Electron Microscope and its Implications for Planetary Science. *Front. Chem.* **9**, 799851. (2021)
- [18] *[Kouchi A.](#), [Furuya K.](#) (18 人中 9 番目), [Shimonishi T.](#) (10 番目), [Hidaka H.](#) (12 番目), [Tachibana S.](#) (17 番目), [Watanabe N.](#) (18 番目) et al. Transmission Electron Microscopy Study of the Morphology of Ices Composed of H₂O, CO₂, and CO on Refractory Grains. *Astrophys. J.* **918**, 45. (2021)
- [19] Ishii A., Shiotari A., *[Sugimoto, Y.](#) Mechanically Induced Single-molecule Helicity Switching of Graphene-Nanoribbon-fused Helicene on Au(111). *Chem. Sci.* **12**, 13301-13306. (2021)
- [20] Sato R., Taniguchi S., Numadate N., *[Hama T.](#) Structure of Crystalline Water Ice Formed through Neon Matrix Sublimation under Cryogenic and Vacuum Conditions. *J. Chem. Phys.* **158**, 211101. (2023)
- [21] *Numadate N., *[Hama T.](#) (6 人中 6 番目) et al. Direct Observation and Quantitative Measurement of OH Radical Desorption During the Ultraviolet Photolysis of Liquid Nonanoic Acid. *J. Phys. Chem. Lett.* **13**, 8290-8297. (2022)
- [22] Nagasawa T., Numadate N., *[Hama T.](#) Infrared Multiple-Angle Incidence Resolution Spectrometry for Vapor-Deposited Amorphous Water. *J. Raman Spec.* **53**, 1748-1772. (2022)
- [23] Nagasawa T., *[Hama T.](#) (8 人中 8 番目) et al. Absolute Absorption Cross Section and Orientation of Dangling OH Bonds in Water Ice. *Astrophys. J. Lett.* **923**, L3(8pp). (2021)
- [24] *Tsuge M., [Kouchi A.](#), [Watanabe N.](#) Measurements of Ortho-to-para Nuclear Spin Conversion of H₂ on Low-temperature Carbonaceous Grain Analogs: Diamond-like Carbon and Graphite. *Astrophys. J.* **923**, 71(8pp). (2021)

8 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応の章にも記載したように、連携コーディネーターを置き、公募研究者も交えての1-2か月ごとに開催する二種類のオンラインセミナー（分野間連携を促すための基礎セミナー、分野横断的なテーマについて議論するマイクロ懇談会）、Astrochemistryに関する分野横断型国際ワークショップを開催するとともに、総括班会議でのホットトピックスの紹介、年に1度の全体集会などを通して密な連携を図っている。これらの活動は総括班が中心となって進め、その結果、下記のように多数の班間・公募研究間の連携研究が実現している（図13）。成果リスト内で班ごとに色分けした著者名からもわかるように、論文として発表された連携研究もある。各班間の連携テーマを以下に記す。これらの連携研究は、境界領域の研究課題の発掘や分野横断的研究の推進につながっている。

A01 観測班：

- ・理論班との連携：原始惑星系円盤にガスや塵が降着する際の物理・化学モデル [A01-6/A03-9 他]、および光度変動する原始星周りでの有機分子の観測研究。
- ・分析班との連携：原始星極近傍で不揮発性物質（鉱物）が気化している高温領域を発見したため、AIOやNaClなどさまざまな不揮発性分子を観測するALMAプロポーザルを共同で提出。

A02 分析班：

- ・公募研究と連携し、リュウグウ初期分析での有機物分析、有機物と鉱物の相互作用の詳細研究を実施。
- ・観測班と連携し、リュウグウ分析結果と最新のALMA, JWST 観測研究の成果を比較したレビュー論文執筆 (Tachibana and Sakai, *Elements*, under review)。
- ・表面実験班と連携し、リュウグウ中有機物構造の可視化で共同研究。リュウグウ試料国際公募に採択。
- ・鉱物表面での分子(CO, H₂O)吸着や反応に関し、大学院生をハブに表面実験班との共同研究を実施。共著論文投稿 (Inada et al., *J. Chem. Phys.*, submitted)。

A03 理論班：

- ・気相実験班、表面実験班との合同マイクロ懇談会をオンラインで主催し、研究進捗状況の報告、研究結果の議論を行っている。
- ・表面実験班とモンテカルロ計算、ネットワーク計算の連携
- ・量子化学計算の計画班と公募研究の連携（高柳+田地川）でトンネル効果の計算
- ・理論モデルと観測班ALMA大型プロジェクト (FAUST, MAPS, eDisk) の連携
- ・原始惑星系円盤の光蒸発計算+化学モデルと観測班ALMA大型プロジェクト (DECOなど) の連携
- ・原始星周構造の物理モデル（花輪, 平野）+化学モデル（野津）と観測班による観測結果の比較

A04 気相実験班：

- ・各グループの実験に関する議論や情報交換等のため公募研究代表者らと合同で毎月ミーティング実施。
- ・原子衝突学会年会のサテライトとして、公募研究代表者も含めた気相反応ワークショップ開催（2022年9月宮崎）。
- ・理論班（ミクロ：量子化学グループ）とC₂⁻分子イオンのポテンシャル計算、NH₃⁺+H₂の水素移行反応、H₃⁺構造異性体の安定性などについて、連携を開始。
- ・公募研究（代表：中井）による気相-固相相互作用に関する分野融合的研究の推進（表面実験班と連携）。

A05 表面実験班：

- ・分析班と隕石やリュウグウ試料に含まれる有機分子のAFMによる単分子観察で連携。隕石とリュウグウ試料の両方で有機分子の骨格像を取得、有機分子の構造に関する知見を取得。
- ・分析班公募研究（大場）が星間分子雲の水を模した試料にUV照射して作製した有機物のAFM単分子観察で連携。これまでに核酸塩基に似た有機分子を確認。
- ・理論班のモンテカルロ計算、ネットワーク計算（表面拡散時間など）への貢献

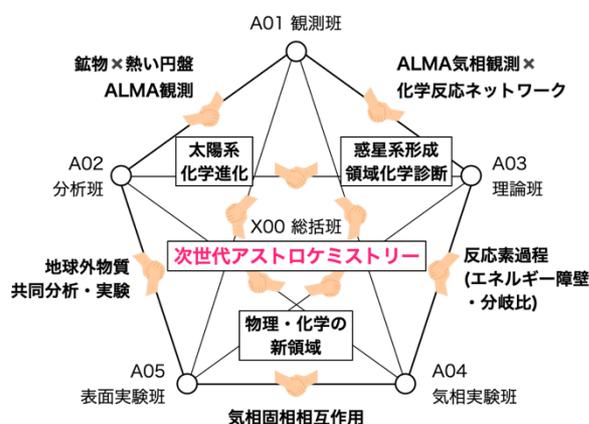


図13 現在進行中の研究計画間連携

9 若手研究者の育成に係る取組状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組状況について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。なお、本研究領域が育成に取り組んだ「若手研究者」の定義を始めに示すこと。

領域全体で支援、推奨してきた若手研究者や学生の国際交流や班間交流を以下にまとめる。また、本領域に関連した研究成果が評価された若手研究者の受賞や昇進も以下に記す（ここで若手とは、学生・PD・助教などを指し、学位取得後15年未満かつnon-PIのものとする）。

【若手による国際交流】

- ・A04 気相実験班 大学院生 齊藤 聖悟さん（立教大）が気相反応に関する共同研究 [A04 文献リスト A04-5] でカレル大学（チェコ・プラハ）に派遣（2021/12–2022/8）。研究成果を国際学会（ドイツ）で発表。齊藤さんは海外の大学院博士課程（University College Cork, Ireland）に進学し、研究を継続中。
- ・A02 分析班 学部4年生 稲田 栞里さん（東大）の国際学会参加ならびに鉱物表面反応に関する分析研究打合せ（米国・ハワイ 2022.7）を支援。その後、大学内の学生向け海外共同研究プロジェクトに採択され、打ち合わせた分析を現地で実施（2023.1）。
- ・A05 表面実験班 大学院生・長澤 拓海さん（東大）を非晶質物質に関する研究打合せ（2週間）でフランス・パリ、モンペリエ、グルノーブルに派遣（2023.2）。
- ・A01 観測班 分担者として、Yao-Lun Yang（楊 耀綸）さん（理研）が参加。
- ・A01 観測班 協力研究者 Nadia Murillo さん南米拠点サーチのための出張一部支援（LMT 観測の可能性）。
- ・A03 理論班 に、若手研究者 German Molpeceres 博士がドイツより来日（JSPS fellow・2022年度）。
- ・A03 理論班 古家 健次さん（国立天文台）が国際会議 Protostars and Planets VII で星・惑星系形成における同位体分別に関するレビュー講演（2023.4）。同会議では本領域の大学院生が多数ポスター発表。海外での対面学会の機会が増えており、今年度も複数件の若手海外発表が予定されている。

【若手による研究計画班間交流】

- ・A01 観測班 研究協力者野津 翔太さんが、JSPS 特別研究員（東京大学）として、A03 理論班に参加。
- ・A02 分析班 大学院生・稲田 栞里さん（東大）が、A05 表面実験班との共同研究でケイ酸塩鉱物表面での分子吸着実験を開始。A05 公募研究者との共同研究論文を投稿（Inada, Tachibana, Hama, *J. Chem. Phys.*）。
- ・A03 理論班 大学院生 大和 義英さんが、野辺山 45m 望遠鏡で A01 観測班チームとの共同観測実施。

【若手研究者の受賞】

- ・A01 観測班・A03 理論班 野津 翔太さん（理研/東大）：日本惑星科学会 2022 年度最優秀研究者賞
- ・A02 分析班 学部4年生（当時）稲田 栞里さん（東大）：日本質量分析学会同位体比部会 学生発表優秀賞（2022.12）・東京大学 理学部 学修奨励賞（2023.3）
- ・A02 分析班（公募）松本 徹さん（京大）：日本鉱物科学会 2022 年度研究奨励賞
- ・A03 理論班 学部4年生（当時）小道 雄斗さん（東大）：東京大学 理学部 学修奨励賞（2022.3）
- ・A03 理論班 大学院生 大和 義英さん（東大）：東京大学 理学研究科 研究奨励賞（2022.3）
- ・A04 気相実験班 大学院生 齊藤 聖悟さん（立教大）：原子衝突学会 優秀ポスター賞（2022.9）・Presentation Award, Winter Workshop at Charles University（2023.1）・立教大学 理学研究科 物理学専攻 修士論文発表会 優秀発表賞（2023.2）
- ・A05 表面実験班 大学院生 佐藤 玲央さん（東大）：結晶成長国内会議 学生ポスター賞（2022.10）
- ・A05 表面実験班 大学院生 藤田 優人さん（慶應大）：Excellent Presentation Award, International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices（2022.10）
- ・A05 表面実験班 大学院生 佐藤 裕和さん（慶應大）：Excellent Presentation Award, International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices（2022.10）

【若手研究者のステップアップ】

- ・A01 観測班 大屋 瑤子さん（東京大 助教 → 京大 基礎物理学研究所 講師）（2022.10）
- ・A01 観測班 下西 隆さん（新潟大 助教 → 新潟大 自然科学研究科 准教授）（2022.4）
- ・A02 分析班（公募）林 佑さん（高エネルギー研究所 研究員 → 立教大 理学研究科 助教）（2023.4）
- ・A05 表面実験班 数間 恵弥子さん（理化学研究所 研究員 → 東京大 工学系研究科 准教授）（2022.4）

10 アウトリーチ活動に係る取組状況

研究領域全体を通じ、一般向けのアウトリーチ活動に係る取組状況について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

領域全体で積極的なアウトリーチ活動を展開してきた。特に ALMA や「はやぶさ2」の成果の訴求力を利用し、様々な場で、本領域がめざす科学の新規性や重要性を伝えてきた。領域代表・坂井が NHK WORLD-Japan 「The Chemistry around Young Stars: Astronomer Nami Sakai」に取り上げられた他、A02 分析班メンバーは NHK サイエンス ZERO や New York Times, 国内主要新聞 への取材協力などを通じ、国内外のメディアで積極的に活動を伝えてきた。領域として、科学館と連携・協力した 講演会シリーズ や 展示 を開催した他、各メンバーも 国内外での普及講演, 小中高の生徒との対話型アウトリーチ, 雑誌連載, 書籍出版 などの活動をおこなってきた。以下に成果を抜粋して、まとめる。

【メディア】プレスリリース含め全 45 件

- 2021.6 NHK WORLD-Japan 「The Chemistry around Young Stars: Astronomer Nami Sakai」(出演) [坂井]
- 2023.2 NHK サイエンス ZERO 「はやぶさ2 最新報告 リュウグウからのメッセージ」(出演・取材協力) [橋・藪田・奈良岡・岡崎・塚本・野口]
- 2023.4-5 しんぶん赤旗 連載「竜宮の玉手箱」(取材協力) [塚本・藪田・奈良岡・岡崎・野口]
- 2022.8 北海道新聞 興味深人『小惑星リュウグウのかけらを分析』(インタビュー) [塚本]
- 2022.6 New York Times 「Asteroid Samples May 'Rewrite the Chemistry of the Solar System」(取材協力) [橋]
- 2021.8 National Geographic 「The 'small wonders' unlocking secrets of the solar system」(取材協力) [橋]
- 2021.1 毎日新聞『はやぶさ2 「カプセル回収の舞台裏」』(寄稿 全3回) [橋]
- 2021.1 New York Times 「Japan's Journey to an Asteroid Ends With a Hunt in Australia's Outback」(取材協力) [橋]
- 2020.12 毎日新聞『宇宙の成り立ちを化学で追究 化学学んだ記者が聞く』(インタビュー) [坂井]

【展示協力】全 2 件

- 2022.1.14-1.18 蒲郡市生命の海科学館 小惑星探査機「はやぶさ2」帰還カプセル特別展示
- 2021.12.4-12.13 日本科学未来館「小惑星探査機「はやぶさ2」カプセル&リュウグウの“かけら”大公開

【普及講演】全 58 件

- 2023.3 日本化学会 市民公開講座：かがくの挑戦『小惑星リュウグウの声に耳をすませて』[橋]
- 2022.5 東京都立大学 オープンユニバーシティ 公開講座『実験室での宇宙に関する物理と化学』[田沼]
- 2022.3 自然科学研究機構シンポジウム『分子からの電波で観る星と惑星系の形成』[相川]
- 2021.12 お茶の水女子大学 理学部 宇宙講演会『化学の眼で見る惑星系の多様性』[坂井]
- 2021.3 輝く女性研究者賞 受賞記念講演会『天文学と化学の融合で切り込む多様な惑星系の起源』[坂井]
- 2021.6-11 蒲郡市生命の海科学館 レクチャーシリーズ☆Online 教えて！リュウグウ
～小惑星と“生命の海”のひみつ～ (全6回) [橋・藪田]

【小中高向け対話型アウトリーチ】全 23 件

- 2023.1 御坊市日高川町大成中学校 講演会『リュウグウから未来への玉手箱』[塚本]
- 2022.12 錦城高等学校『光でのぞく分子の世界』[水瀬]
- 2022.4-7 はまぎん こども宇宙科学館 “リュウグウのサンプルが語り始めたこと” (全8回)
[橋・藪田・奈良岡・岡崎・塚本・野口]
- 2021.12 HORIBA “宇宙” と “はかる” —高校生向け分析体験セミナー (オンライン交流会) [塚本・橋]
- 2021.6 駒場東邦中学校 2年生オンライン講演会『物理と化学と天文学-私たちの起源を考える-』[坂井]

【国際アウトリーチ】全 4 件

- 2022.9 Science in Japan Forum 『What we have learned from Hayabusa2-returned Ryugu samples』[橋]
- 2022.9 NASA-JAXA SNS event 『Ryugu & Bennu: Ask your questions!』[橋・奈良岡]

【雑誌・書籍】全 17 件

- 2023.2 『宇宙の化学—プリズムで読み解く物質進化』(岩波科学ライブラリー) [羽馬]
- 2022.12 『星くずたちの記憶 銀河から太陽系への物語』(岩波科学ライブラリー Kindle版) [橋]
- 2022.11 『大好きなことを研究する科学者になろう!! 宇宙編』(理化学研究所編・扶桑社) [坂井]
- 2022.9- 『リュウグウのささやきを聴く』(岩波「科学」連載中) [橋]
- 2022.1 『化学で宇宙を研究 太陽系や生命の謎を追う』(日経サイエンス フロントランナー挑む) [藪田]

11 研究費の使用状況・計画

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や今後の使用計画、研究費の効果的使用の工夫、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

全体として、コロナ禍およびウクライナ情勢の影響により、研究費使用計画には無視できない影響があったが、国際会議の延期開催・実験や計算研究実施における順序の工夫などにより、概ね順調に使用している。国際会議開催延期や海外訪問延期の影響が大きく出る総括班経費については、やや多めの繰り越し額となっているが、オンライン議論やハイブリッド会議開催などの対応により、研究活動そのものは順調に進んでいる。以下に各班の予算使用・繰り越し状況、および今後の使用計画などについて記す。

X00 総括班：初年度に事務用 PC 等を購入し、総括班活動を開始したが、コロナ禍での星間物質国際ワークショップの延期と事務員雇用の遅延が生じ、総額 378 万を繰り越した。なお、対面型セミナーやワークショップ開催の困難による領域広報活動の代替案として領域ロゴやパンフレット等を作成して広報に努めている。2 年次に行う予定であった領域全体での国際会議は、コロナ禍を考慮し、3 年次に延期し、ハイブリッド形式で実施した。さらに、2-3 年次には A04 班大学院生海外共同研究派遣を実施した。また、星間物質国際ワークショップは隔年開催していることから、3 年次に開催予定であったものを 4 年次（今年度）に延期して完全対面型で実施する。海外出張がしやすくなったこともあり、昨年度には、若手支援として、A02 班学部生、A05 班大学院生を海外派遣（学会および研究打ち合わせ）した。

A01 観測班：初年度に、分子分光装置に搭載する ALMA 型超伝導ミキサ受信機用の高額物品を購入した。また、Shaoshan Zeng 氏を雇用し、ALMA アーカイブデータのサーチを行った。ストレージと希少同位体薬品サンプルの納期遅延があったため、一部繰り越した。2 年次は受信機バックエンド関連の物品を購入した他、分子分光解析を専門とする小山貴裕氏も雇用した。3 年次は、購入予定であった ALMA データ解析用 MacPro や受信機バックエンド改良のための物品がウクライナ情勢の悪化により高騰したが、小山貴裕氏が定年制スタッフ研究員に栄転したためその分の予算を振り替えた（小山氏は 3 年次より観測班分担者）。なお、3 年次も薬品納期遅延により一部予算を繰り越している。

A02 分析班：リュウグウサンプルは地球環境への暴露が最小限に抑えられた試料であることから、初期分析の実施に際し、清浄環境の整備に必要な物品購入（クリーンブース、グローブボックスなど）や 1 年間限定の優先分析であったこともあり、消耗品を不足なく準備するために用いた。当初予定では、研究計画班メンバーが国際分析チームメンバーの研究室へ訪問するための海外旅費や、海外研究者の訪日のための旅費を計上していたが、コロナ禍により、計画していた旅費の利用がなくなったため、それらは分析のための予算に振り替えた（予定より多量のサンプルが持ち帰られ、分析予算が必要となった）。リュウグウサンプルの有機物から、分子進化をさかのぼる実験については、サンプルの分析・観察結果をもとに、宇宙風化ならびに天体表面熱変成実験から開始し、既存装置を有効利用できたため、一部予算は繰り越して、今年度以降の物価高騰や納期延長による実験研究推進対応に回している。

A03 理論班：コロナ禍で研究員雇用が遅れた分の予算を繰越したが、後半 2 年間は研究員 3 名体制とすることでカバーする。理論班は計算機以外には実験器具が必要ない分、人材が重要であるが、ようやくコロナ禍の影響が小さくなり、若手人材がそろってきた。

A04 気相実験班：研究員を雇用すべく複数の方と調整を行っていたが、いずれもコロナ禍の影響により入国できず、雇用に至らなかった。一方、電子機器やレーザー機器の購入に際し、世界的半導体不足による価格高騰の影響を受け、計画を大きく超える経費が必要となった。このため人件費分を機器備品費に振替えて対応した。一部、資材難で長納期化している機器等については、繰越制度を活用し、柔軟に対応できている。

A05 表面実験班：研究員 1 名を雇用し、研究を加速させている。塵モデル表面作製のためのパルスレーザー堆積装置を拡張し、より多くの条件を効率よく検討できるような仕様にした。現有の走査トンネル顕微鏡 (STM) のコントローラーを最新のものに切り替え、より精密な計測が可能になるようにした。計測チャンバー内の不純物を極微量にするための小型空冷式ドライポンプ、プローブ顕微鏡による測定に必要な Q-plus センサ、ステージの位置決めを正確に行うためのロータリーステージ、単結晶基板表面を清浄化するために必要なイオンソースなどを購入した。なお、計測に使用していた現有の STM に取り付けられているコンビネーションポンプが故障（修理不可能）したため、新しいものを購入した。

12 今後の研究領域の推進方策

研究領域全体を通じ、今後の本研究領域の推進方策について、「これまでの学術の体系や方向を大きく変革・転換させることを先導する」観点から、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、今後実施する公募研究の役割を明確にすること。また、研究推進上の問題点がある場合や、国際的なネットワークの構築等の取組を行う場合は、その対応策や計画についても記述すること。

研究組織の連携体制にもあるように、各班間の連携による境界領域の研究課題の発掘や分野横断的研究の推進は順調に進んでおり、成果も出てきている。研究領域のさらなる学際的な広がりや推進し、新しい学術体系の構築のために、各班のメンバーとは異なった研究手法や観点を持った研究者による公募研究と積極的に関わり、本領域が設定する研究課題の解決ならびに星間化学の変革に向けて幅広い視点を有する学術体系・研究組織づくりを強力に推進する。以下に、各班の今後の推進方策を具体的に記す(図14)。

X00 総括班：

- 各研究項目において、これまでに得られた成果を土台とし、項目間の有機的連携のさらなる強化を支援する。**A01 観測班**、**A02 分析班**、**A03 理論班**による共同観測提案・リュウグウ分析データと天文観測データ比較・太陽系における分子進化モデル構築、**A03 理論班**、**A04 気相実験班**、**A05 表面実験班**による新たな実験データ(エネルギー障壁、分岐比)を取り込んだ化学ネットワークモデル、**A02 分析班**、**A05 表面実験班**による地球外有機物の構造直接観察・天然鉱物表面の分子反応などすでに始まっている連携に加え、新たな連携も積極的におこなえるよう、総括班会議での議論を継続する。
- ウィズコロナ社会に対応し、若手研究者の海外派遣や海外研究協力者の訪日援助を積極的に推進することで、国際ネットワークを強化し、本領域で得られる新たな視点や学術の体系を世界に広げる。
- 変革された新たな学術体系とするためには、領域メンバーによる教科書執筆は有効な手段であると考え、最終年度以降に教科書執筆をめざした議論を開始する。

A01 観測班：

- ALMA 大型観測プログラム FAUST や銀河系外縁部の原始星の観測により、特徴ある個々の天体の詳細な化学組成を明らかにし、新たな化学組成の多様性の軸を探るとともに、テンプレートとして利用する。また、化学組成変化を利用して円盤形成・進化過程を探り、理論班の物理モデルと比較する。
- ALMA 化学サーベイ観測の広範な展開により、硫黄や窒素を含む分子の軸での化学組成の全貌をつかむとともに、理論班と連携し、進化の進んだ円盤と比較することで、惑星への多様性の伝播を探る。
- 分子分光測定実験により、これまでの CH₂DOH などの重水素同位体種の存在量の導出に大きな問題があることを示した。正しいパラメータを用いることで正しい重水素濃縮度を求めることが可能になったため、ALMA 望遠鏡の観測データを用いてそのような研究を推進する。
- 個別観測プロジェクトにより、大質量星周りの熱い領域では不揮発性分子の観測が可能であることを発見したため、分析班と共同で本格的な観測研究を開始したいと考えている(提案書提出済)。
- ジェイムズ・ウェッブ宇宙望遠鏡(JWST)による氷の観測結果を解析し、ガス分子の組成比率などと比較する。
- 同位体比・ガスと氷の組成の比較・不揮発性分子観測などを通して、分析班の結果と比較し、太陽系の過去を化学的多様性の中に位置づける。また、気相実験班・表面実験班と重要な分子・反応についての情報を共有する。
- 光度が変動する原始星に着目し、変動状態を調べるとともに、そこで塵氷層から蒸発するであろう有機分子の観測を行って通常天体における組成と比較することで気相-固相相互作用の効果を検証する(理論班、および公募研究との連携)。

A02 分析班：

- 世界で初めて持ち帰られたC型小惑星リュウグウサンプルが太陽系元素存在度の新たな基準となるポテンシャルを秘め、また、太陽系誕生時からの有機物を残すことがわかり、学術的価値は高く、継続して論文成果発表をおこなう。国際公募分析では、表面実験班と連携し、AFM分析技術を用いて、リュウグウ有機物の構造の可視化にも取り組む
- 2023年9月にNASAの探査機 OSIRIS-REx が小惑星ベヌーのサンプルを持ち帰る。この試料の分析には橋、塚本、奈良岡、大場(公募)が参加することが決まっている。リュウグウサンプルの有機物との比較研究を国際共同研究として推進する。
- リュウグウやベヌーで得られた有機物分析結果をもとに太陽系初期の化学条件へ遡るための実験研究

(特に原始惑星系円盤での有機物進化、分子雲条件での有機物合成)を進める。

- これらの分析や実験で得られる成果は観測班、理論班と共有し、観測班とは共同観測、理論班とは太陽系における分子進化を描き出す。
- 地球外物質に含まれる鉱物などの表面で起こる分子反応の素過程理解を表面実験班とともに進める。

A03 理論班：

- 電磁流体力学モデルと原始星円盤への非対称ガス降着現象の観測の比較等を行うとともに、エンベロープ落下速度問題や形成初期の厚い円盤構造についての研究を進める。なお、国内の流体計算コミュニティではこれまで分子輝線の観測にはあまり参入していなかったが、複数のALMA大型プロジェクトや個別の共同研究を機に徐々に分子輝線観測の重要性が理解されてきている。彼らと連携することで研究を加速させる。
- 星形成にともなう化学組成変化を追うために古典的な擬似時間依存近似モデルが用いられているが、より現実的な変化を追うためにはこれを脱却する必要がある。そのため、国内で特に盛んな分子雲形成流体研究との協同を目指す。動的分子雲形成モデルの構築と分子進化の研究を学生とともに進める。
- 表面吸着エネルギーの population を含む反応ネットワークモデルを構築する(表面実験班との連携)。
- 量子化学計算を専門とする German Molpeceres 博士の参入にともない、EU (Thanja Lamberts 博士ら)との連携を強化する(国際連携)。
- 理論モデルとの連携で観測班と共にALMA望遠鏡などの新規観測提案を行い、様々な環境下での大型分子の振る舞いを調べる。

A04 気相実験班：

- コロナ禍の影響で当初計画から多少の遅れはあるものの、3拠点で実験装置開発が着実に進行し、パイロット実験の成果が出始めており、本格的な実験研究を推進する。また、得られた情報を必要に応じて理論班のネットワーク計算に組み込み、当該反応が化学組成に与える影響を吟味する。
- 領域全体での議論を通じて、実験対象とする反応系について検討、絞り込みを行いながら、実験を進める。具体的には、これまで成果が出ている直線型H₃⁺の存在の可能性の検証、CH₃F、NO⁺分子の反応速度にあらわれる回転温度依存性の検証などを行うとともに、その他領域全体でフォーカスする反応系などあれば含めて測定を行う。領域に貢献する実用的な研究データの取得を目指す。
- 原子分子科学や関連分野における基礎研究としての側面も重視する。気相班には専門を異とする多くの公募研究代表者(第1回6件、第2回5件)が参画している。研究期間後半も密な連携を継続し、より広い学術分野を巻き込んで、学術の変革を先導していく。

A05 表面実験班：

- 分析班と連携し、隕石、リュウグウ試料、星間分子雲の模擬試料のそれぞれに含まれる個々の有機分子をAFMにより分析・比較し、質量分析法や分光法と相補的な知見を得ることを目指す。これは、本研究領域が発足して初めて可能になった新たな研究の方向である。
- 計画通りに表面反応実験を進め、理論班に分子の付着・拡散・脱離についての情報を提供するとともに、かんらん石単結晶を分析班から提供してもらい、水の反応などもAFMで光照射・表面観察する。この研究は、「絶縁体表面における単分子反応を光で制御する」技術の開発に繋がる可能性がある。これまでにAFMを使った反応制御などは例がなく、大きな成果になると期待している。

| 研究計画 | 2020 | 2021 | 2022 | 2023 | 2024 |
|-----------|---|--|----------------|--|------------|
| A01 観測班 | | 星・惑星系形成領域の化学的多様性の軸の探求 分光装置開発 → 分光実験 | | JWSTとの連携 / 化学的多様性全貌解明と 気相固相相互作用の観測的検証 | |
| A02 分析班 | リュウグウ 試料帰還 | リュウグウ試料初期分析 宇宙風化実験・表面熱進化実験 | | 小惑星ベヌー試料分析・リュウグウとの比較 / 原始惑星系円盤・分子雲有機物進化実験 | |
| A03 理論班 | | 円盤形成物理モデル・吸着を考慮した反応ネットワーク 種々の手法での反応ポテンシャル曲面決定・分子動力学 | | 動的分子雲形成・分子進化 / 形成初期円盤 / 表面反応・気相反応量子化学計算 | |
| A04 気相実験班 | 実験装置の開発・性能評価 (合流ビーム・イオントラップ・イオン移動管) | | → 初期実験 | 直線型 H ₃ ⁺ 検証 / CH ₃ F, NO ⁺ 反応速度の回転 温度依存性 / 星間化学に実用的な気相反応実験 | |
| A05 表面実験班 | 実験装置の開発・性能評価 モデル表面構築・表面観察 | | 表面反応実験 | 分子の付着・拡散・脱離に関する表面反応実験 / 絶縁体表面における単分子反応の光制御 | |
| X00 総括班 | 基礎セミナー・連携研究セミナー・国際会議 全体集会 第1回公募 全体集会 | | 第2回 全体集会 公募 | さらなる連携推進 (研究計画・公募・国際) | 次世代星間化学教科書 |

次世代アストロケミストリー

- 太陽系化学進化モデル構築
- 惑星系形成領域進化化学診断の確立
- 物理・化学の新領域の開拓

図 14 年次計画と研究進捗状況

13 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制（総括班評価者の氏名や所属等）や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

松本 吉泰 先生（京都大学 名誉教授／分子分光・表面科学）

本学術変革領域研究は、電波天文観測を中心とした観測班と地球外物質分析を中心とした分析班を核とし、星間空間における気相反応（気相実験班）や星間塵の表面を反応場とした表面反応（表面実験班）に取り組む実験班とミクロからマクロにおよぶ現象を取り扱う理論班を設置したバランスのとれた研究グループ構成であり、次世代アストロケミストリーとして新たな学理を創成することを目的としている。

各班においてそれぞれ新規で重要な研究成果を挙げているが、ここでは学術変革領域研究においてもっとも成果が期待される班をまたいだ連携研究に焦点をあてたい。本領域研究開始後に「はやぶさ2」が小惑星リュウグウの貴重なサンプルを持ち帰ったのはタイムリーであった。このサンプル分析において本研究領域が主体的な役割を果し、リュウグウでの水質変成による鉱物と有機物の共進化の証拠、太陽系誕生前の分子雲で生成したと考えられる有機物の発見、アミノ酸などの生命必須分子の存在、などいくつもの新発見を成したのは当該領域研究の大きな成果である。特筆すべきは、この分析にあたって分析班のみではなく原子間力顕微鏡の適用など表面科学研究者との連携を含む広い共同研究が実施され、それがこれらの成果に実っていることである。したがって、このことから本領域の研究グループを組織したことの意義がきわめて高いことは明らかである。

これ以外にもそれぞれの班をまたぐ共同研究による成果も挙がっている。たとえば、宇宙空間にある塵表面での固相反応を明らかにすることは重要な課題であるが、表面拡散エネルギーと吸着エネルギーの比が吸着種によらないと仮定した従来モデルの検証を理論班と表面実験班が行なった。表面科学の立場からするとこの仮定自体がそもそも受け入れ難いものであるが、実際にこれが現実的でないことを表面実験班が実験的に明らかにし、またこれを考慮した反応ネットワークモデルの不安定性を理論班が検証したことは、班間をまたぐ連携研究の成果として評価できる。

本領域研究の参加者の専門分野がかなり多岐にわたっているため、同じ現象についてもそれに関連した学術用語が分野によって異なるなどの問題がありコミュニケーションの阻害原因になっている。また、異なる専門分野の考え方や手法の理解促進も共同研究を実施するためには不可欠である。このために総括班が中心となって定期的なオンラインセミナーを開催することにより、分野間の垣根を低くし、研究者間の忌憚のない議論の促進を図っている点は共同研究を促進する上で重要であり、高く評価できる。

以上のような実績や、全体の運営方法における工夫を鑑みると本領域の研究進展はきわめて順調であるといえる。本領域研究が目指す学理創成を残された期間で成すためには、研究領域全体にかかわる具体的な研究目標を絞りこみ、公募研究も含めて各班がどのようにそれに貢献できるかという戦略的な研究の計画とその遂行が必要であろう。そのためには、総括班が具体的な目標についてのより強いメッセージを出し、各班員、研究参加者をさらに有機的に組織して共同研究を促進させる指導力を発揮することを期待したい。

土山 明 先生（立命館大学 招聘教授・広州地球化学研究所 教授／惑星物質科学）

本研究は採択時期の関係から開始時期が遅れたこと、また新型コロナパンデミックやウクライナ軍事侵攻による影響を受けたにも関わらず、この中間評価実施時点では、研究は概ね順調に進んでいる。とくに研究項目 A01 観測班や A02 分析班では、それぞれ原始太陽系円盤形成領域での化学的多様性や小惑星リュウグウサンプル分析について、大きな成果がすでに挙げられている。これらは、それぞれ ALMA 望遠鏡を用いた観測や「はやぶさ2」計画といった大型プロジェクトの恩恵を受けたとも言えるが、大型プロジェクトの利点を活かして、これらを反映した成果を確実に挙げている。一方で、装置開発を研究のスタートとして掲げている研究項目 A04 気相実験班や A05 表面実験班では、装置や実験手法の開発やその運用、試料作成の評価が主たる成果となっていることは、致し方ないと思われる。オンラインセミナーを積極的に活用し、公募研究も含めた領域全体の有機的な連携をはかっていることも、評価できる。

評価者の専門に近い分野である A02 や A05 の一部について、以降コメントを述べる。小惑星探査機「はやぶさ2」が採取した C 型小惑星リュウグウのサンプル分析により、現在までに得られた成果は多岐に

わたるが、これらのうちで最も大きな成果は、(1) ”地上風化を受けていない”CI コンドライト隕石に対応した物質であることを明らかにしたこと、および (2) 太陽系形成前に生成されたものや生命必須分子など多様な有機物が見出されたことである。(1) については、CI コンドライトは太陽系固体物質の原材料と考えられる始原的な隕石である炭素質コンドライトの中でも、太陽系の化学組成を求める基準となっている最も重要な隕石グループである。今回の分析により、我々が手にしている数少ないCI コンドライトは、地球落下以降に大気中の水蒸気や酸素により変質（地上風化）を受けていることが明らかとなり、太陽系の形成・進化を理解する上で、リュウグウサンプルの重要性が明らかとなった。(2) については、多様な有機物がすでに炭素質コンドライトでも見出されているが、地上での汚染がないリュウグウサンプルに見出された意義は極めて大きい。また、CO₂を含む水溶液が地上風化を受けていないリュウグウサンプルで初めて発見され（CM と呼ばれるグループの炭素質コンドライトに次いで2例目）、炭素質コンドライトをもたらした小天体（微隕石）が太陽系の外縁部で生成されたという近年の太陽系形成モデルを確証するものである。今後のさらなる詳細な分析や、また 2023 年 9 月に地球帰還予定の NASA 「OSIRIS-REx」 探査機による小惑星ベヌーのサンプル分析も含めて、太陽系形成やその進化についての新しい知見が得られるとともに、他の研究項目（A01, A05 など）と連携した研究により、当該領域研究の当初の目的が達成されることが大いに期待される。また、A05 において、宇宙塵を構成する物質として氷とともに重要な Fe, Mg 珪酸塩鉱物の清浄表面が、今回導入されたパルスレーザー堆積（PLD）装置により得られるようになった。これまで研究が先行していた氷だけでなく、珪酸塩鉱物表面を用いた実験により、当該領域研究が目指している中間温度・中間密度での「星間化学」の進展が期待される。

尾中 敬 先生（東京大学 名誉教授／星間物理学）（2023 年より評価者）

新型コロナの影響もある中、各研究班とも着実に研究を進め、十分な成果を上げていると評価できる。A01 班は計画通り ALMA 観測データの解析を進め、異なる空間スケールでの分子種の分布の変化を明らかにするなどの新しい成果が得られている。これらの成果に基づいた新たな観測提案もなされている。A02 班ではリュウグウサンプルの分析が順調に進められ、公募研究とも連携し、リュウグウサンプルが太陽組成に近い化学組成をもつこと、宇宙風化の影響、さらには有機物の分析において、予想以上の研究成果が得られている。A03 班では、マイクロ過程の計算方法の開発、ダスト表面反応の精密な取り扱い手法の開発など、着実に成果が得られている。A04 班では3つの実験手法の開発を進める中で H₃⁺の異性体の可能性など、予想外の結果も得られている。A05 班では、精密な塵モデル表面の生成手法の開発や、表面での素過程の分析手法の開発が順調に進められている。これから後半の研究期間内に研究計画で予定されている実験が進み、大きな成果が得られることが期待される。

オンラインセミナーなど、公募研究のグループも含め、研究班間の連携を促進する取り組みも工夫して進められ、公募チームとの共同研究や、研究班間での共同研究もいくつか始まっている。これらの共同研究が、いろいろな分野を融合した今後のアストロケミストリーの新しい研究に発展することを期待する。これらには若手研究者や学生による研究成果も多く含まれており、この分野の若手研究者の育成にも大きく貢献していると思われる。

以上のように計画班の研究、公募研究、またそれらの間の共同研究など、それぞれ個々の研究では様々な成果があがっている。プレスリリースや普及講演などのアウトリーチも十分に行われており、研究計画の中間報告としては、十分な内容になっていると思われる。各研究班間の連携による共同研究も進められ、一定の成果が得られている。今後後半の研究期間に、これらを統合した形で、いろいろな条件下での惑星系形成の一般的な描像、あるいはそれに基づいた我々の太陽系の形成過程の新しい描像など、研究領域全体としてのまとまった大きな成果が得られることを期待したい。

（領域からの追記）本領域では天文学の専門家として、長谷川 哲夫先生（国立天文台 特任教授／星間物理学）にも評価委員を務めていただいているが、個人的なご事情のため、今回評価コメントはいただけない。代替処置として、新たに尾中 敬 先生（東京大学 名誉教授／星間物理学）にも評価委員に加わっていただき、コメントをいただいた。