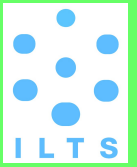




SPICAによる分子性固体の遠赤外領域観測で 展開するサイエンスの検討



背景

分子雲や原始惑星系円盤内に存在する、氷星間塵と呼ばれるサブミクロンサイズの水微粒子は、鉱物微粒子の周りをH₂Oを主成分とした比較的蒸発温度の低い様々な分子によって構成された氷マントルに覆われた構造をしている。この氷マントルは、気相からの分子吸着や塵表面上での化学反応で生成された分子が、水素結合やファンデルワールス結合で結びついてできている柔らかい固体（分子性固体）である。これら分子性固体の結晶状態である、水素結合結晶やファンデルワールス結晶の特徴として、分子内結合力と分子間力の区別が明確であるため、分光学的に結晶状態に関する研究に適している。結晶状態の特徴を反映する格子振動エネルギーは遠赤外線領域に対応するため、SPICAが有する遠赤外線領域観測の強みを生かし、星間塵氷マントルの観測で結晶状態が関与するサイエンスを展開するという考えのもと、以下の3つのテーマ、1.「氷XIの検出」、2.「氷星間塵の熱履歴の推定」、3.「窒素固体の検出」について検討を行った。

検討課題1：「氷XIの検出」

目的：日常的に目にする氷結晶の状態として知られる氷Ihの酸素原子配置をそのままに、水素原子位置も一方向に秩序化した、氷XIと呼ばれる結晶状態が低温・常圧下において存在するといわれている。氷Ihから氷XIへの転移速度は非常に遅いと言われていたが、低温環境下で、かつ長い時間スケールで氷が保持されている宇宙環境では、氷XIが多く存在している可能性がある。氷XIは、極性分子であるH₂Oの配向が揃った構造をしているため強誘電性を示す。つまり、もし星間塵氷マントル内に一定量の氷XIが存在すれば、氷星間塵表面電位構造に影響を与え、塵の合体成長等に関わるサイエンスに大きな影響を与える。そこで、星間塵氷マントル内における氷XIの存在を検出を試みる。

方法：氷XIの構造として考えられているCmc₂構造は、氷Ihに存在する67μm付近に現れるサブピークを持たないことが理論的に指摘されている[1]。そこで、上記波長領域において星間塵氷マントルの吸収スペクトル測定を行い、67μmのピーク強度から氷XIの存在を推察する。測定する氷星間塵には氷Ihが形成されていることが必要であるため、比較的温度的高い領域（120-140K）が観測の対象となる。

予想される問題点：このテーマを研究する際に問題になると予想される点は、アモルファス氷の存在である。観測対象となる氷マントルに、ある割合でアモルファス氷が含まれていた場合、上記波長領域にもアモルファス氷由来のブロードなピークが現れ、このブロードなピーク成分があたかも67μmにピークがあるかのように偽装してしまう可能性がある。この効果を取り除いて氷XIの存在の推定を行うためには、他の波長帯における測定からアモルファス氷の混入量の見積りや、室内実験にて上記波長帯を含む広域な波長帯で詳細な氷Ihおよびアモルファス氷のスペクトルを取得し、それを用いたデコンボリューション等の作業が必要になると考えられ、容易ではない可能性が高い。

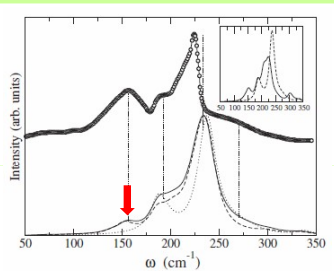


FIG. 2. Open circles represent the experimental spectrum from Refs. 10 and 13. The solid bold line represents $\epsilon''(\omega)$ calculated summing over the 17 different phases and integrating the L-O-T-O splitting over q . The thick dashed line represents $\epsilon''(\omega)$ calculated summing over the 17 different phases without L-O-T-O splitting. The dotted line represents $\epsilon''(\omega)$ calculated integrating the L-O-T-O splitting over q , but only for the ground state Cmc₂. Inset: IR spectrum of the two lowest energy structures (see text). Profeta and Scandolo, *Phys. Rev. B*, **84**, 024103 (2011).

検討課題2：「氷星間塵の熱履歴の推定」

目的：分子雲や星周エンベロープにおいて、星間塵氷マントルの形成や進化の過程を理解するための一つのアプローチとして、星間塵が経験した熱の履歴を調べるという方法が考えられる。なぜなら、その星間塵が経験した熱の履歴を知ることが、その進化過程に制約を与えることができたためである。星間塵氷マントル内にはH₂Oだけでなく様々な分子種が含まれており、それら分子の結晶化温度はもちろん、分子種に依存して様々な値をもつ。そこで、結晶化温度の異なるいくつかの分子種に対して結晶化を示す吸収ピークの観測を行い、星間塵が経験した熱の履歴を調べる。

方法：星間塵氷マントルには様々な分子が存在していることが明らかになっているが、観測を容易にするため、比較的存在度が高いことが知られているH₂O、CH₃OH、NH₃を対象として測定を行う。これら分子の結晶化温度はそれぞれおよそ、140K、120K、100Kであるため、この温度領域において温度分解能をもつ温度計になる。それぞれの分子種において、結晶状態時に特徴的に表れるピークを観測対象とすることで、容易に結晶状態の有無を確認できるようにする。観測するピーク波長は、H₂Oは44μm[2]、CH₃OHは29μm、NH₃は24μm[3]である。これらのピークを持つ吸収係数に極端に小さいものは無いため、比較的観測しやすいものと考えられる。

予想される問題点：上述したピークは室内実験で得られたそれぞれの分子種単体で測定されたスペクトルをもとにしているため、実際の氷マントルのように混合された固体に対しても、同様なピーク強度や形状の変化が保証されるかどうか定かではない。それを確かめるためには、室内実験による混合状態におけるスペクトル測定が事前に必要となると考えられる。

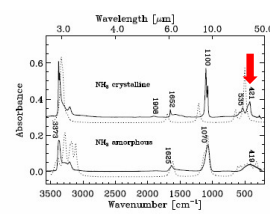


Fig. 1. Experimental (solid line) and calculated (dotted line) IR spectrum of NH₃ ice. The laboratory spectra of amorphous NH₃ was deposited and recorded at 10 K, while the crystalline spectrum of NH₃ was obtained after warming up to 100 K.

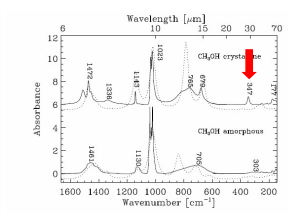


Fig. 2. Experimental (solid line) and calculated (dotted line) IR spectrum of CH₃OH ice. The laboratory spectra of amorphous CH₃OH was deposited and recorded at 8 K, while the crystalline spectrum of CH₃OH was obtained after warming up to 120 K. B. M. Giuliano et al., *A&A*, **565**, A108 (2014).

検討課題3：「窒素固体の研究」

目的：分子雲内には、いくつかの窒素原子を含んだ分子が観測によって見つかった。しかし、これらから見積もられる窒素原子の量は、窒素原子の全宇宙存在度と比較すると圧倒的に少ないことが知られている。つまり、窒素原子は今現在において我々が観測できていない、何かしらの状態で分子雲内に存在していると考えられる。この未検出な、窒素原子の主要なリザーバーとして期待されているのはN₂分子であるが、気相のN₂分子は永久双極子を持たないため電波観測や赤外線観測では検出できない。一方、分子雲内は低温環境にあるため、N₂分子は固体として存在している可能性が高い。固体のN₂は、遠赤外線領域に非常に鋭い吸収ピークを持つことが知られており、もし、多量の固体N₂が星間塵上に存在し、吸収ピークを検出することができれば、N₂存在量の見積りが可能になり、窒素原子欠乏の問題を解決できる可能性がある。そこで、固体N₂の検出を試みる。

方法：窒素固体は35K以下ではαという結晶構造が安定相である。このα相は遠赤外線領域において、200μmに非常に鋭い吸収のピークを持ち、139μm付近にはブロードな弱い吸収ピークを持つ[4]。よって、35K以下の温度領域に存在する星間塵氷マントルを測定対象とし、ピーク形状が鋭く、ピークの検出がしやすい200μmのピークの検出を試みる。

予想される問題点：先行研究から見積もった吸光係数は3×10⁻²² cm molec⁻¹と非常に小さな値であり[5]、吸収ピーク検出には困難が予想される。また、N₂固体の吸収ピークが得られても、氷マントルに比較的多量に存在するCO固体は198μmに吸収ピークを持つため、ピーク分離・判別も必要となる可能性がある。よって、室内実験による混合氷スペクトルデータの事前取得が必要になる。

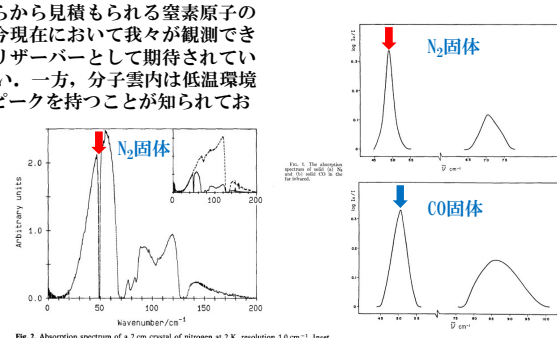


Fig. 2. Absorption spectrum of a 2 cm crystal of nitrogen at 2 K, resolution 1.0 cm⁻¹. Inset shows the same spectrum relative to the background transmission (dotted curve). G. Guelachvili et al., *Mikrochim. acta*, **2**, 339 (1988). Ron&Schnepp, *J. Chem. Phys.*, **46**, 3991 (1967).

参考文献

- [1] G. Profeta and S. Scandolo, *Phys. Rev. B* **84**, 024103 (2011).
- [2] R. G. Smith, G. Robinson, A. R. Hyland, G. L. Carpenter, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **271**, 481 (1994).
- [3] B. M. Giuliano, R. M. Escibano, R. M. Doménech, E. Dartois, G. M. Muñoz Caro, *Astron. Astrophys.* **565**, A108 (2014).
- [4] G. Guelachvili, K. N. Rao, R. H. Tapping, B. P. Winniewisser, M. Winniewisser, *Mikrochim. acta*, **2**, 339 (1988).
- [5] A. Ron and O. Schnepp, *J. Chem. Phys.* **64**, 3991 (1967).