

氏 名 一村 亮太

学位(専攻分野) 博士(学術)

学位記番号 総研大甲第 2681 号

学位授与の日付 2026 年 3 月 24 日

学位授与の要件 先端学術院先端学術専攻 (天文科学コース)
学位規則第6条第1項該当

学位論文題目 The Evolution of Organic Molecules from Star- and Planet-
Forming Regions to the Solar System Traced by Isotopic
Signatures

論文審査委員 主 査 服部 公平
天文科学コース 准教授
安井 千香子
天文科学コース 助教
谷口 琴美
天文科学コース 助教
相川 祐理
東京大学 大学院理学系研究科 教授
坂井 南美
理化学研究所 開拓研究所
坂井星・惑星形成研究室 主任研究員

博士論文の要旨

氏 名：一村 亮太

論文題目：The Evolution of Organic Molecules from Star- and Planet-Forming Regions to the Solar System Traced by Isotopic Signatures

This thesis presents a theoretical study on the formation and isotopic evolution of complex organic molecules (COMs) in star-forming regions, with particular emphasis on carbon isotope fractionation and isotopomer-specific processes. The work addresses three central questions: (1) how COMs acquire their isotopic compositions during the early phases of star and disk formation, (2) which formation pathways dominate under interstellar conditions, and (3) whether the position of ^{13}C within a molecule can be used to constrain its formation pathway. To answer these questions, a three-phase (gas, grain surface, and ice mantle) gas-grain chemical model is developed and applied, incorporating isotopomer-resolved reaction networks that track position-specific $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios. The network includes both thermal and non-thermal chemical processes relevant to COMs formation, such as radical-radical reactions on ice surfaces, non-diffusive chemistry, and cosmic-ray-induced radiolysis, enabling the model to follow the coupled chemical and isotopic evolution from prestellar cores to protostellar environments.

Using this framework, the thesis first investigates the evolution of carbon isotope ratios of COMs during the prestellar-to-protostellar transition. Particular attention is paid to how different precursor carbon reservoirs (CO , C , or C^+) and isotope exchange processes in cold cores imprint distinct ^{13}C signatures on COMs. The results demonstrate that molecules synthesized from CO -derived carbon systematically exhibit mild ^{13}C enrichment, whereas those originating from C or C^+ reservoirs tend to be ^{13}C -depleted due to gas-phase isotope exchange chemistry. When only classical warm-up chemistry is considered, the model overestimates the isotope fractionation seen in COMs observed in protostellar environments. However, by incorporating recently proposed C-atom reactions on CO - and H_2O ices, the model introduces efficient grain-surface formation channels that partially erase excessive fractionation, leading to significantly improved agreement with observed $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios of selected COMs and highlighting the critical role of cold-grain chemistry in regulating isotopic signatures prior to ice sublimation.

Building on this result, the thesis then extends the approach to isotopomer-resolved modeling to examine whether carbon isotope patterns can distinguish among

different COM formation pathways. Motivated by recent ALMA detections of carbon isotopomers of COMs and JWST detections of COMs in interstellar ices, a reaction network is constructed to track the position of ^{13}C within each molecule (e.g., $\text{H}^{13}\text{COOCH}_3$ versus $\text{HCOO}^{13}\text{CH}_3$), preserving carbon-atom positions throughout grain-surface and ice-mantle chemistry. This enables predictions of isotopomer- and functional-group-specific $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios in star-forming cores, accounting for both thermally driven radical-radical reactions on warm ice surfaces and non-thermal radiolysis chemistry in bulk ice. The model shows that COMs—particularly those containing methyl groups such as $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, CH_3CHO , and CH_3CN —can exhibit clear isotopomer differences in their $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios, reflecting whether their carbon originates from CO versus C/C^+ reservoirs and whether their formation is governed by surface or mantle chemistry under thermal or non-thermal conditions.

These astrochemical results are further discussed in the broader context of meteoritic organic matter, especially meteoritic amino acids. By comparing isotopomer- and position-specific signatures predicted for interstellar COMs with compound- and position-specific isotope measurements of meteoritic organics, the thesis explores whether meteoritic materials may retain interstellar isotopic memory. Emphasis is placed on relative intramolecular isotopic patterns, which are more robust to observational uncertainties, spatial gradients, and parent-body alteration than absolute bulk ratios, thereby providing a potential conceptual bridge between interstellar chemistry and Solar System organic matter.

Overall, the thesis demonstrates that isotopomer-resolved astrochemical modeling provides a physically grounded framework for interpreting molecular isotopic signatures across star- and planet-forming environments, highlighting the importance of non-equilibrium chemistry, time-dependent physical evolution, and material transport. The results point toward closer integration between isotopomer chemistry, forthcoming high-sensitivity ALMA and JWST observations, and laboratory constraints, with the ultimate goal of establishing robust isotopic connections from the interstellar medium to Solar System materials.

博士論文審査結果

Name in Full
氏名 一村 亮太

Title
論文題目 The Evolution of Organic Molecules from Star- and Planet-Forming Regions to the Solar System Traced by Isotopic Signatures

惑星系がどのようなプロセスを経て形成されたのかを理解することは、現代天文学の重要な課題である。観測の進展によって現在では数千個の系外惑星が発見されており、分子雲から生じたプレステラーコア (prestellar core) が重力崩壊して原始星を形成し、その周囲に原始惑星系円盤が生まれるという物理的描像は確立されつつある。本論文は、原始星周囲で検出されている COMs (complex organic molecules; 複雑有機分子) に焦点を当て、COMs の炭素同位体置換体比や同位体位置異性体比がどのように進化するのかをシミュレーションを通じて理解することを目的としている。

第 1 章では、イントロダクションとして、星・惑星形成の普遍性を概観しつつ、星や原始惑星系円盤の化学的進化の理解に向けた基礎枠組みを提示している。具体的には、星形成領域におけるアストロケミストリーの役割、主要反応経路、COMs や同位体化学の重要性を論じた後、本論文の数値シミュレーションの比較対象である ALMA による観測結果を提示している。

第 2 章では、COMs の ^{13}C 同位体置換体比に着目したシミュレーションについて論じている。まず、星形成コアの時間発展を現実的に記述する物理モデルとして採用された Masunaga & Inutsuka (2000) の 1 次元流体モデルについて紹介し、このモデルから得られる流体パーセル内で COMs の化学進化を追うための数値計算手順が述べられている。次に、コアの重力収縮前から原始星形成後までの進化過程で、COMs の $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ 比がどのように推移するかの結果が示されている。特に、観測された $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ 比を説明する上では、C 原子付加反応を組み込むことが重要であるという結論が得られた。この知見は、炭素の同位体置換体比が COMs の生成過程を理解する上で重要な指標となり得ることを示唆している。

第 3 章では、 $^{13}\text{CH}_3\text{CHO}$ や $\text{CH}_3^{13}\text{CHO}$ のように ^{12}C と ^{13}C の位置が異なる COMs を区別した化学反応ネットワークを構築し、第 2 章と同じ 1 次元流体モデルを用いて COMs の存在量の時間変化を追跡したシミュレーションについて論じている。ここでは、第 2 章と同様に各 COM の存在量が時間とともにどのように変化するかについて、詳細な結果が示されている。さらに、これらの理論計算に基づき、将来の観測に向けた展望も議論されている。例えば、現状の ALMA 観測では $^{13}\text{CH}_3\text{CHO}$ や $\text{CH}_3^{13}\text{CHO}$ の存在量の推定値には

30%程度の不定性が含まれているが、不定性を 20%程度まで低減できれば、COMs の生成過程に対して有意な制約を与えられると指摘されている。

第 4 章では、第 2 章と第 3 章で述べられた化学モデルや観測的知見を総合し、COMs の生成・進化について包括的な議論を行なっている。また、不確定要素や将来の改善点、今後必要とされる観測データについて展望を示している。

補遺では、第 3 章で用いられた化学反応ネットワークの構築方法について述べられている。ここでは、化学構造の線形表記法である SMILES 記法を活用し、通常の化学反応ネットワークから同位体位置を区別した反応ネットワークへと自動拡張するコードの概要が示されている。

本論文において、数値計算とその解釈、論文作成の一連の過程は、出願者が主体となっていて行っている。また、第 3 章で議論されている、 ^{12}C と ^{13}C の位置が異なる COMs を区別した詳細なシミュレーションは前例がない。このような計算は一村氏が開発した反応ネットワーク自動拡張コードによって初めて成し遂げられたものであり、数値計算の結果は将来の観測結果の解釈に有用である。以上の理由により、審査委員会は、本論文が学位の授与に値すると判断した。