

宇宙中的化学拼图: 冷暗星云中的复杂有机分子

全冬晖*, 卢杨

之江实验室天文计算研究中心, 杭州 311100

* 联系人, E-mail: donghui.quan@zhejianglab.org

The chemical puzzle of the universe: complex organic molecules in cold dark clouds

Donghui Quan* & Yang Lu

Research Center for Astronomical Computing, Zhejiang Laboratory, Hangzhou 311100, China

* Corresponding author, E-mail: donghui.quan@zhejianglab.org

doi: [10.1360/CSB-2025-0289](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-0289)

在宇宙的深处, 寒冷而幽暗的分子云静静地漂浮着. 这些分子云不像地球上充满生机的海洋或郁郁葱葱的森林, 而是密度极低, 约为每立方厘米 10^4 个氢核, 比地球大气稀薄约15个数量级; 温度更是低至10 K(约 -263°C), 比地球上最寒冷的南极冰川还要冷得多^[1]. 在这样的环境中, 化学反应似乎是不可能发生的任务: 稀薄的气体让分子之间的碰撞变得如同大海捞针, 而极低的温度使分子几乎失去动能, 难以跨越任何能量势垒^[2]. 然而, 令人惊叹的是, 化学过程依然在这些冷暗分子云中悄然上演. 近年来, 天文学家在金牛座分子云1号(TMC-1)等冷暗分子云中发现了众多的复杂有机分子(complex organic molecules, COMs), 如二甲醚(CH_3OCH_3)、甲酸甲酯(HCOOCH_3)、乙醛(CH_3CHO)、甲醇(CH_3OH)和乙醇($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$)^[3]. 复杂有机分子能在如此极端的环境中存在和积累, 使它们的形成机制成为天文学和星际化学领域引人注目的谜团.

冷暗分子云中不仅有稀薄的气体, 还有无数微小的尘埃颗粒, 每颗直径仅约 $0.1\ \mu\text{m}$ ^[4]. 而尘埃表面覆盖着一层冰壳, 由水(H_2O)、一氧化碳(CO)、甲烷(CH_4)等简单分子冻结而成^[5]. 几十年来, 科学家一直认为, 这些冰面上的分子会通过缓慢地扩散靠近彼此, 发生碰撞并形成新的化学键, 最终生成更复杂的分子^[6]. 此类过程被称为扩散反应, 是星际化学研究中的一个基本假设. 例如, 一个甲醇分子(CH_3OH)可能在冰面上慢慢移动, 与另一个甲基(CH_3)结合, 生成二甲醚(CH_3OCH_3). 然而, 在10 K的极低温度下, 扩散所需的能量远

远超过分子所能获得的热能^[2]. 这种能量短缺让传统理论陷入了困境: 甲醇分子就像被冰封一样, 根本无法移动到另一个分子旁边. 那么, 这些复杂的有机分子究竟是如何诞生的呢? 二甲醚的两个甲基如何连接到氧原子? 甲酸甲酯的酯键又从何而来? 这些问题促使科学家们重新审视星际化学的规则, 探索超越传统扩散的新机制^[1].

近年来, 一个全新的思路逐渐浮出水面: 宇宙射线可能是这些复杂有机分子形成的关键推手. 宇宙射线是来自宇宙深处的高能粒子, 比如质子、电子或更重的原子核, 它们以接近光速的速度穿越空间, 几乎无处不在^[7]. 即使在冷暗分子云的深处, 这些高能粒子也能穿透厚厚的尘埃层, 撞击到冰面上的分子. 当宇宙射线击中尘埃颗粒时, 会将巨大的能量传递给冰层中的分子, 使它们从稳定的状态变为活跃状态, 甚至断裂成自由基^[8]. 这种过程就像在平静的冰面上扔下一颗小石子, 激起一圈圈涟漪. 被激发的分子或自由基不需要移动, 就能与周围的分子发生反应, 形成新的化学键. 这种机制被称为辐射化学(radiolysis), 为低温环境下COMs的生成提供了全新的解释^[1]. 具体来说, 一个甲醇分子(CH_3OH)被宇宙射线击中后, 可能会分解为甲基自由基($\text{CH}_3\cdot$)和羟基自由基($\text{OH}\cdot$)^[8]. 这些自由基非常活跃, 能立即与旁边的分子发生反应. 例如, 甲基自由基可能与另一个甲醇分子结合, 生成二甲醚(CH_3OCH_3); 或者与一氧化碳(CO)进一步反应, 最终形成甲酸甲酯(HCOOCH_3)^[1]. 此类反应不需要分子在冰面上移动, 而是依靠宇宙射线提供的能量直接驱动^[8]. 更令人兴奋的是,

引用格式: 全冬晖, 卢杨. 宇宙中的化学拼图: 冷暗星云中的复杂有机分子. 科学通报, 2025, 70: 2607–2609

Quan D, Lu Y. The chemical puzzle of the universe: complex organic molecules in cold dark clouds (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 2607–2609, doi: [10.1360/CSB-2025-0289](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-0289)

这种辐射化学可能引发连锁反应。被宇宙射线激活的自由基不仅自己参与反应,还可能带动周围的分子一起加入化学过程^[9]。例如,一个甲醇分子被激发后分解为甲基和羟基,甲基与另一个甲醇分子反应生成二甲醚,而羟基可能与一氧化碳结合生成甲酸(HCOOH),随后进一步形成甲酸甲酯。这种连锁效应就像多米诺骨牌,一个小小的起点就能引发一系列复杂的化学变化。在TMC-1这样的冷暗分子云中,传统扩散模型预测的二甲醚丰度远远低于观测值,而引入宇宙射线驱动的非扩散机制后,模拟结果与实际观测数据吻合得惊人^[3]。这表明,宇宙射线不仅是能量来源,还可能是解开星际化学谜团的一把钥匙^[1]。

宇宙射线的作用不仅限于激发冰面反应,它还有另一种重要的贡献:非热溅射(sputtering desorption)。当高能粒子撞击尘埃颗粒上的冰层时,冰面分子可能会被“弹出”,从固态直接进入气相,就像敲击一块冰块时飞溅出的碎片^[4]。这种过程将原本冻结在冰面上的分子(如CH₃OH或CH₃OCH₃)释放到分子云的稀薄气相中,极大地增加了分子碰撞和反应的机会^[1]。气相中的分子不再受冰面的束缚,可以自由移动,甚至携带从宇宙射线中获得的额外能量。这种能量有助于反应物越过势垒,让一些在冰面上原本难以发生的化学过程成为可能^[7]。例如,一个被溅射出的甲醇分子可能在气相中遇到另一个分子,结合生成乙醛(CH₃CHO)^[10]。或者,一个二甲醚分子被弹出后,可能与其他气相分子反应,进一步生成更复杂的化合物。这种冰相到气相的转变非常关键,因为气相中的反应条件与冰面上截然不同。在冰面上,分子被固定在位置上,反应受到严格限制;而在气相中,分子可以四处飘荡。科学家通过实验测量了非热溅射的效率,例如Dartois等人^[4]用高能粒子轰击含CO和H₂O的冰层,发现每次撞击能释放出少量分子到气相。这些实验数据被纳入计算机模型,模拟结果显示,非热溅射与冰面上的非扩散反应共同作用,能显著提高COMs的气相丰度,与TMC-1的观测数据高度一致^[1]。这种机制还解释了为什么我们在冷暗分子云中能探测到如此多样的COMs。冰面上的反应生成初始分子,而非热溅射将它们释放到气相,进一步参与新的化学过程^[7]。这种冰相-气相的耦合就像一个高效的化学生产线,不断生产和丰富分子云中的复杂有机分子。例如,甲醇生成后可能通过溅射进入气相,随后与气相中的甲基反应生成二甲醚^[1]。这种双重机制弥补了传统扩散模型的不足,为低温环境下的化学多样性提供了合理的解释。

尘埃颗粒的表面性质同样对化学反应至关重要。这些微小颗粒虽然直径仅0.1 μm,但数量众多,表面积加起来十分可观^[4]。它们的冰层表面可能存在微小凹陷或缺陷,这些“活性点”能降低反应的能量势垒,促进COMs的生成^[6]。例如,一个甲醇分子在冰面上生成后,可能因表面缺陷的催化作用,与旁边的分子结合生成二甲醚^[1]。这种反应在无数尘埃颗粒上重复进行,最终在整个分子云中积累起大量复杂有机分子。

然而,尘埃的作用并非永恒不变。在恒星形成阶段,新生恒星发出的紫外辐射会穿透分子云,破坏冰面上的分子^[5]。例如,二甲醚可能被分解为甲基和CO,甲酸甲酯可能断裂为甲醇和甲酸^[9]。而在分子云深处的寒冷区域,厚厚的尘埃层能挡住辐射,保护里面的分子,使它们得以保存和积累^[11]。这种动态平衡塑造了分子云中化学成分分布。尘埃颗粒还有一定的催化作用。冰层表面的微小缺陷或痕量金属原子能降低反应的能量需求,让化学键更容易形成^[6]。例如,一个CO分子可能因表面缺陷的帮助,与氢原子更快结合生成甲醇。这种催化效应虽然微小,但在分子云的巨大尺度上却能产生显著影响。然而,尘埃的作用也有局限性。在恒星形成时,紫外辐射会破坏冰面上的分子^[5]。例如,一个稳定的二甲醚分子可能被分解为甲基和CO,失去原有的结构。而在分子云深处的寒冷区域,尘埃则能更好地保护分子,维持化学过程的稳定性^[11]。

此外,分子云的演化阶段也会影响COMs的命运。在恒星尚未形成的冷暗阶段,化学反应主要由宇宙射线驱动,COMs得以缓慢积累^[1]。一旦恒星诞生,辐射和温度升高可能摧毁这些分子,但同时也可能引发新的反应路径。例如,紫外光可能将甲醇分解为自由基,进一步生成更复杂的化合物^[5]。这种从平静到活跃的转变,让分子云的化学过程充满了动态性和复杂性。

星际复杂有机分子的发现不仅在天文学上意义重大,还引发了对生命起源的深刻思考。乙醇(C₂H₅OH)、甲酸甲酯(HCOOCH₃)、乙醛(CH₃CHO)等分子在地球上生物化学的基础成分^[11]。它们是氨基酸、糖类等生命分子的前体,而如今我们知道,这些分子早在星际介质中就已经存在^[10]。比如,在太阳系形成时,一团冷暗分子云坍缩成了恒星和行星,而COMs很有可能被包裹在尘埃颗粒中,随尘埃一起落入原始地球的大气或海洋^[5]。如果环境条件合适,比如有了液态水和适当的温度,这些分子可能进一步反应,生成更复杂的化合物,甚至成为生命出现的起点。例如,甲酸甲酯可能分解后参与氨基酸的合成,乙醛可能转变为糖类的前体^[11]。

随着科技的进步,我们对冷暗星云中COMs的了解将越来越深入。詹姆斯·韦布空间望远镜(James Webb Space Telescope, JWST)已于2021年发射,它能利用红外光穿透尘埃,探测分子云深处的化学成分^[10]。JWST的高分辨率和灵敏度能捕捉到微弱的分子信号,帮助科学家确认COMs分子的分布和丰度。平方公里阵列(Square Kilometre Array, SKA)也在建设中,预计2030年代投入使用,它将通过高分辨率射电观测,精确测量这些分子的气相丰度^[11]。这些先进工具就像天文学家的“新眼睛”,将为非扩散机制提供更强观测支持,并可能发现更多隐藏的分子种类,例如氨基酸的前体。这些数据结合后,不仅能验证辐射化学和非热溅射的作用,还能揭示分子云不同区域的化学差异。科学家还希望通过这些观测,探索COMs与恒星形成的关系。例如,在恒星诞生前的冷暗阶

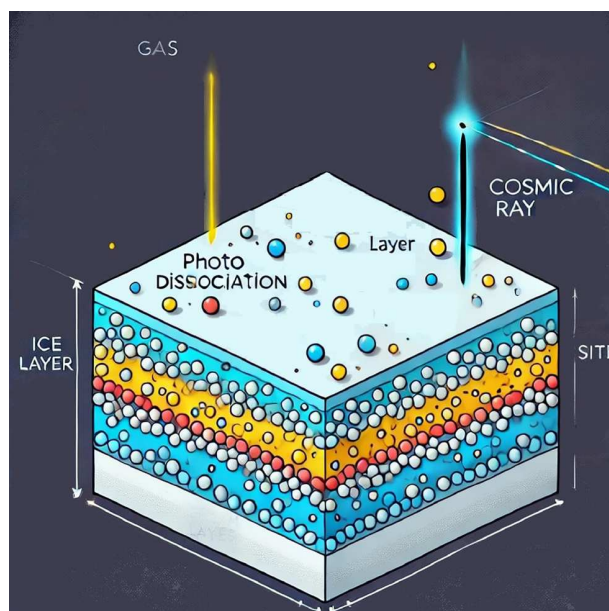


图1 (网络版彩色)冷暗分子云中的复杂有机分子形成机制示意图

Figure 1 (Color online) Schematic diagram of the formation mechanism of complex organic molecules in cold dark molecular clouds

段, COMs如何积累? 在辐射增强后, 它们又如何演化?

冷暗星云中的复杂有机分子是宇宙中一幅迷人的化学拼图。从宇宙射线的能量输入^[7], 到非热溅射的分子释放^[4], 再到尘埃颗粒的催化作用^[6], 这些机制共同驱动了COMs的形成, 如图1所示。它们不仅揭示了恒星和行星形成的化学基

础^[11], 还可能与生命的起源有着深远的联系^[10]。每一次新的发现, 都让我们更接近这幅拼图的全貌。未来的观测和实验还将带来更多线索, 或许有一天, 我们能完整拼出这幅“宇宙中的化学拼图”, 看到从分子云到生命的全貌。这场探索仍在继续, 而每一步的进展, 都可能为我们带来新的启示。

推荐阅读文献

- 1 Lu Y, Quan D, Chang Q, et al. Modeling complex organic molecules' formation in cold cores: multiphase models with nonthermal mechanisms. *Astrophys J Suppl Ser*, 2025, 277: 8
- 2 Herbst E, van Dishoeck E F. Complex organic interstellar molecules. *Annu Rev Astron Astrophys*, 2009, 47: 427–480
- 3 Cernicharo J, Marcelino N, Agúndez M, et al. Discovery of HC_3O^+ in space: the chemistry of O-bearing species in TMC-1. *Astron Astrophys*, 2020, 642: L17
- 4 Dartois E, Chabot M, Id Barkach T, et al. Cosmic ray sputtering yield of interstellar ice mantles. *Astron Astrophys*, 2021, 647: A177
- 5 Öberg K I, Boogert A C A, Pontoppidan K M, et al. The Spitzer ice legacy: ice evolution from cores to protostars. *Astrophys J*, 2011, 740: 109
- 6 Garrod R T, Herbst E. Formation of methyl formate and other organic species in the warm-up phase of hot molecular cores. *Astron Astrophys*, 2006, 457: 927–936
- 7 Shingledecker C N, Herbst E. A general method for the inclusion of radiation chemistry in astrochemical models. *Phys Chem Chem Phys*, 2018, 20: 5359–5367
- 8 Chang Q, Herbst E. Unified microscopic–macroscopic Monte Carlo simulations of complex organic molecule chemistry in cold cores. *Astrophys J*, 2016, 819: 145
- 9 Balucani N, Ceccarelli C, Taquet V. Formation of complex organic molecules in cold objects: the role of gas-phase reactions. *Mon Not R Astron Soc-Lett*, 2015, 449: L16–L20
- 10 Bacmann A, Taquet V, Faure A, et al. Detection of complex organic molecules in a prestellar core: a new challenge for astrochemical models. *Astron Astrophys*, 2012, 541: L12
- 11 Vastel C, Ceccarelli C, Lefloch B, et al. The origin of complex organic molecules in prestellar cores. *Astrophys J*, 2014, 795: L2