



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Molecules during Stellar Formation and Death

Li, X.

Citation

Li, X. (2015, February 12). *Molecules during Stellar Formation and Death*. PhD Thesis.
Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/31856>

Version: Not Applicable (or Unknown)

License: [Leiden University Non-exclusive license](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/31856>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/31856> holds various files of this Leiden University dissertation

Author: Xiaohu Li

Title: Molecules during stellar formation and death

Issue Date: 2015-02-12

Nederlandse samenvatting

S.1 Het moleculaire heelal

Het heelal is *enorm*, maar veel van de hemellichamen die we 's nachts zien – planeten, sterren, sterrenstelsels – hebben hun oorsprong in microscopische processen tussen atomen en moleculen. Deze deeltjes zenden ook veel lijnen uit die kunnen worden gedetecteerd door gevoelige telescopen: daarom onderzoeken astronomen tegenwoordig het heelal door studie van *kleine* dingen – op de schaal van moleculen en hun interacties. Dit vereist kennis van zowel *sterrenkunde* als *chemische fysica*, daarbij bijdragend aan de vooruitgang van de *astrochemie* die, in principe, onze vragen over het heelal kan beantwoorden op het niveau van *kwantummechanica* – Wat fascinerend! De oorsprong van het heelal is mogelijk kwantummechanisch: we wonen in een ‘moleculair heelal’(Tielens 2013).

Tot op de dag van vandaag zijn bijna 180 verschillende moleculen (zonder isotopologen mee te tellen) geïdentificeerd in de ruimte met behulp van hun ‘vingerafdrukken’: de rotationele, vibrationele en electronische spectra ^a. Deze lijst bevat kleine moleculen zoals CO en H₂O, en grote moleculen zoals polycyclisch aromatische koolwaterstoffen (PAKs) en fullerenen, bijvoorbeeld C₆₀⁺, C₆₀ en C₇₀. Het is bekend dat moleculen abundant en wijd verspreid zijn in alle fases van het neutrale interstellair medium, van diffuse wolken tot dichte ster- en planeetvormingsgebieden, en van de omhulsels van stervende sterren tot de centrale gebieden van sterrenstelsels. De rijke chemie van deze deeltjes opent mogelijkheden voor onderzoek naar de ontstaansgeschiedenis en evolutie van sterren, sterclusters, sterrenstelsels en interstellair materie, zowel chemisch als fysisch. Dit komt doordat de excitatie en abundantie van moleculen worden bepaald door botsingen, die op hun beurt afhangen van gas dichtheid en temperatuur, en van het stralingsveld in hun omgeving (van Dishoeck 2014). Dit betekent dat moleculen kunnen worden gebruikt als ‘leurstof’ aan specifieke processen of omstandigheden.

Complexe, prebiotische interstellair moleculen vertegenwoordigen mogelijk de eerste stappen richting leven elders in het heelal. De mens is niet alleen in het heelal – in elk geval niet vanuit het perspectief van zijn samenstelling: er is geen groot verschil tussen de moleculen waaruit wij bestaan en die gevonden worden in de moleculaire wolken, planeten, sterren, nevels en vele andere hemellichamen. Astrochemie kan dus helpen om de oorsprong en evolutie van onze eigen planeet en ons zonnestelsel en uiteindelijk ‘nszelf’ter te begrijpen. Met name door dit laatste aspect is de onderzoeksinteresse in dit gebied de afgelopen jaren verder toegenomen.

S.2 De gouden tijd van de astrochemie

Astrochemie, ook bekend als moleculaire astrofysica, is de studie van de rijke en diverse chemie die voorkomt in het hele heelal (Herbst & Yates 2013). Meer specifiek is

^a<http://www.astro.uni-koeln.de/cdms/molecules/>

dit de studie van de ‘vorming, vernietiging en excitatie van moleculen in astronomische omgevingen en hun invloed op de structuur, dynamica en evolutie van astronomische objecten’ (Dalgarno 2008). Met dank aan de snelle vooruitgang in wetenschap en technologie leven we nu in een gouden tijd voor de studie van de astrochemie.

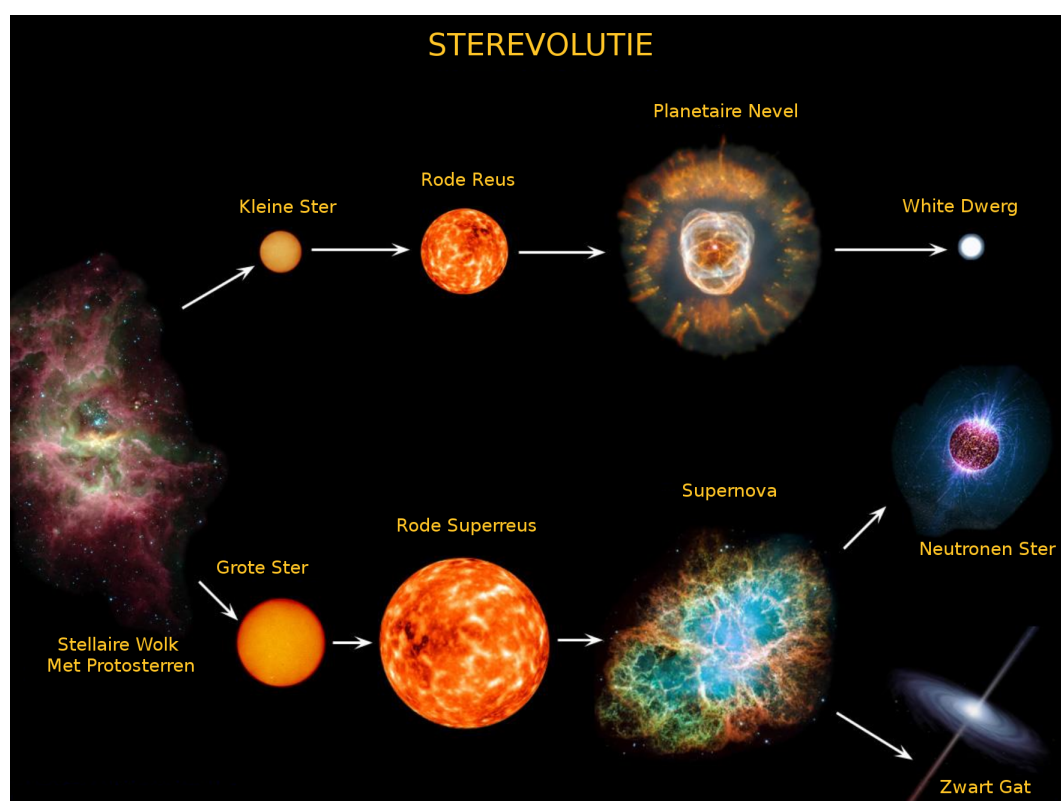
Observationeel gezien is zeer veel vooruitgang geboekt door nieuwe telescopen. Er zijn bijvoorbeeld onlangs snelheid-opgeloste spectra beschikbaar gekomen op ver infrarode golflengtes die niet toegankelijk zijn van de grond. Dit geldt met name voor H_2O , waargenomen met behulp van het ‘Heterodyne Instrument for the Far-Infrared’ (HIFI) aan boord van de *Herschel Space Observatory* (Pilbratt et al. 2010; de Graauw et al. 2010). Men verwacht dat de Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) gaat leiden tot een nieuw decennium van astrochemie door een enorme toename van gevoeligheid en spatiële resolutie in vergelijking met eerdere faciliteiten. Samen met andere ruimtemissies zoals de James Webb Space Telescope (JWST), en verder in de toekomst, 30–40 m klasse optische-infrarode telescopen zoals de European Extremely Large Telescope (E-ELT) en de Thirty Meter Telescope (TMT), zullen deze instrumenten het mogelijk maken om astrochemie direct waar te nemen op de relevante fysische schaal, zowel spatieel als spectraal. Er bestaat geen enkele twijfel dat de vooruitgang onze verbeelding zal overtreffen, met als voorbeeld de recente Rosetta missie.

Rosetta vormt een mijlpaal in de sterrenkunde die geschiedenis heeft gemaakt door als eerste ruimteschip op een komeet te landen. Rosetta is een robot-ruimtesonde, gebouwd en gelanceerd door de European Space Agency, die momenteel bezig is met een gedetailleerde studie van komeet 67P/Churyumov-Gerasimenko, waarbij de instrumenten aan boord van de satelliet beelden en data verzamelen die informatie geven over de samenstelling van de komeet, inclusief de aanwezigheid van complexe organische moleculen. Zelfs sterrenkundige experts waren pas overtuigd van het succes van Rosetta toen ze de video en beelden van de satelliet en haar lander Philae ‘life’ zagen. Rosetta geeft een uniek beeld van het meest primitieve materiaal in ons eigen zonnestelsel, en dus van haar oorsprong.

Nauwkeurige reactie-coëfficiënten van belangrijke chemische processen zijn noodzakelijk voor astronomen vanuit chemisch-fysisch perspectief. Deze kunnen zowel experimenteel gemeten en/of theoretisch berekend zijn. Computatieve methodes maken gebruik van (quasi-)klassieke en kwantummechanische methoden (of gemengde methoden), gebaseerd op zeer nauwkeurige *ab initio* potentiële energie oppervlakken. Deze methodes hebben enorm geprofiteerd van zowel de toenemende processorkracht en beschikbaarheid van krachtige (super) computers, als van nieuwe numerieke methodes.

Verscheidene chemische databases zijn nu online beschikbaar, met het doel om verschillende types astrochemische modellen te ondersteunen, en het is belangrijk dat ze up-to-date gehouden worden. Bijvoorbeeld de vijfde uitgave van de UMIST Database for Astrochemistry (UDfA, McElroy et al. 2013), hierna RATE12, bevat nu 6173 gasfase reacties van 467 soorten moleculen. Dit soort databases zijn nodig voor het simuleren van de chemie in verschillende fysische omgevingen, zoals donkere wolken, protoplanetaire schijven en circumstellaire omhullende gaswolken.

Moderne chemische fysica en astrochemie ondersteunen en inspireren elkaars vooruitgang, wat leidt tot een mooie en veelbelovende toekomst voor beide vakgebieden.



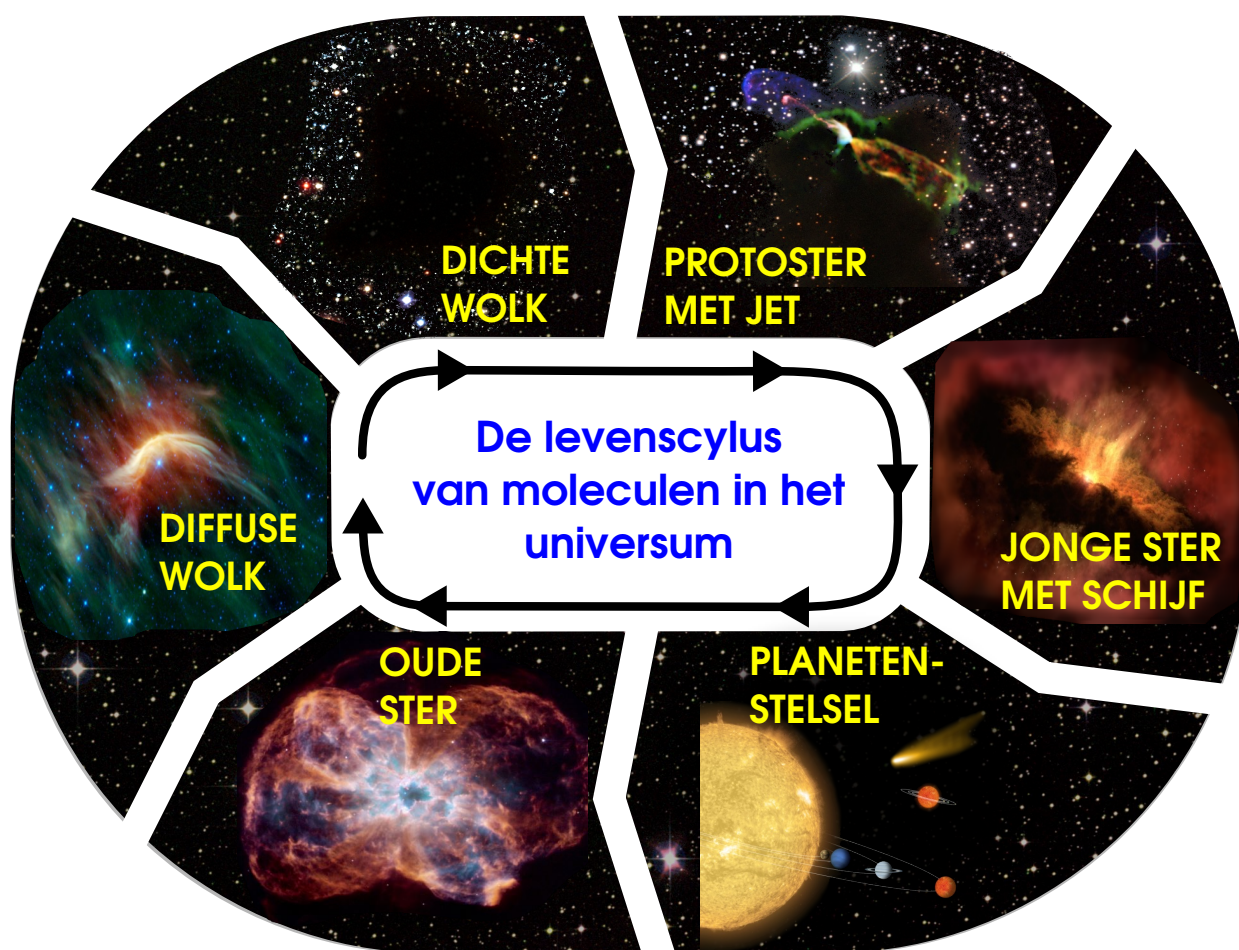
Figuur S.1 — De evolutie van een ster, gebaseerd op haar massa. Een lage massa ster eindigt als een witte dwerg, een massieve ster evolueert tot een neutronenster of een zwart gat. Figuur van E. Moravveji.

S.3 De vorming, evolutie en het afsterven van sterren

Het is bekend dat sterren worden gevormd in koude en dichte moleculaire wolken. Om een normale ster te vormen moeten deze wolken instorten, wat kan worden geïnduceerd door externe krachten ofwel door hun eigen zwaartekracht. Als de wolk zich bijvoorbeeld dichtbij een grote supernova bevindt kan de externe druk leiden tot haar instorting. Ook kunnen twee dichte moleculaire wolken met elkaar botsen door zwaartekracht. Meerdere sterren kunnen onmiddellijk worden geboren na de botsing van twee sterrenstelsels.

Fig. S.1 laat een algemeen beeld van de evolutie van een ster zien. Zodra deze gevormd is hangt haar toekomst af van de initiële massa. Lage massa (kleine) sterren, met name die met een massa van minder dan $8 M_{\text{Zon}}$, passeren de rode reus en planetaire nevel fases voor ze eindigen als een witte dwerg. Massieve (grote) sterren gaan door de rode superreus fase en eindigen als supernova, waarbij ze een neutronenster of zwart gat produceren. Er zijn veel vragen rond deze scenario's, met name over het evolutionaire traject van de massieve ster, die plaatsvindt in een geclusterde omgeving. De discussie van dit proefschrift is gecentreerd rond de chemie van moleculen gedurende de geboorte en het overlijden van lage massa sterren, die beter begrepen zijn.

De vorming van een lage massa ster kan worden verdeeld in verscheidene evolutionaire fases. Het proces van de instorting van een donkere kern tot protoster tot pre-hoofdreeksster met een schijf waarin planeten vormen duurt enkele miljoenen jaren. Uiteindelijk verdwijnt ook deze schijf en er blijft een jonge ster met een kleine hoeveelheid



Figuur S.2 — De levenscyclus van moleculen in het heelal. Figuur door M. Persson, afkomstig van van Dishoeck (2014).

gruis in de schijf over. Ons zonnestelsel is door deze fases heen gegaan en nu, ongeveer 4.6 miljard jaar later, draagt ze nog steeds de sporen van deze vormingsprocessen. De gravitationele instorting van de wolk maakt warmte vrij waardoor de temperatuur van de protoster toeneemt en deuterium kernfusie induceert. Dit wordt gevolgd door waterstof kernfusie die zorgt dat de ster op de hoofdreeks blijft voor een lange stabiele periode. Lage massa sterren eindigen als een witte dwerg nadat het materiaal voor kernfusie uitgeput raakt. Een van de belangrijkste fases gedurende de late etappes van de evolutie is de asymptotische reuzentak (AGB). AGB sterren zijn in het bijzonder interessant omdat ze materiaal hun omgeving in schieten, waarbij een warm en dicht circumstellair omhulsel wordt gevormd. Dit proces leidt tot de vorming van nieuwe moleculen en de kernen van stofdeeltjes, en daarmee wordt gas en stof tot het ISM gerecycled voor de volgende cyclus van stervorming (Fig. S.2).

S.4 Inhoud van dit proefschrift en vooruitzicht

Dit proefschrift onderzoekt de chemie van interstellair en circumstellair moleculen gedurende de vorming en het afsterven van sterren. De onderwerpen van de vier hoofd-

stukken en de hoofdvragen waarop deze gericht zijn worden hieronder geschetst. Vanuit het perspectief van chemische fysica is het belangrijkste resultaat van dit proefschrift dat de snelheden voor twee essentiële reacties voor de eerste keer nauwkeurig bepaald zijn: N_2 fotolyse en reactiesnelheden van OH met H (zowel toestand-naar-toestand en thermisch).

In Hoofdstuk 2 wordt de fotodissociatie snelheid van interstellair N_2 bepaald. Stikstof is één van de meest abundante elementen in het heelal, en de verdeling van stikstof tussen N and N_2 bepaalt de vorming van meer complexe prebiotische stikstofhoudende moleculen. Fotodissociatie (of fotolyse) is de primaire vernietigingsroute van N_2 in elke omgeving waar UV-fotonen aanwezig zijn. Nieuwe fotolyse-snelheden en afschermingsfuncties voor N_2 zijn berekend op basis van een zeer nauwkeurig spectroscopisch model van het molecuul. Vervolgens zijn de $N \rightarrow N_2$ overgangen in fotodissociatie gebieden (PDRs) en andere astrofysische omgevingen gemodelleerd, en er wordt een vraagteken gesteld bij de enige, marginale detectie van N_2 in het absorptiespectrum van een diffuse wolk.

In Hoofdstuk 3 worden de nieuw afgeleide N_2 fotolyse-snelheden van Hoofdstuk 2 toegepast op de chemie in het circumstellaire omhulsel van een koolstof-rijke AGB ster, IRC +10216. Deze bron is de dichtstbijzijnde reuzetak-ster en het helderste object in het ver infrarode golflengtegebied, en één van de meest molecuulrijke bronnen aan de hemel. Volgens een gevoeligheidsanalyse van het gehele chemische netwerk is het $N_2 + h\nu \rightarrow N + N$ proces één van de meest significante reacties in de buitenste schil, maar de onzekerheid in dit proces was groot en het werd tot nu toe nooit correct geïmplementeerd. Naast de recent gerapporteerde fotolyse-snelheden en afschermingsfuncties van N_2 en CO in onze modellen, is ook een nieuw volledig 3D sferisch model van een isotroop interstellair stralingsveld gebruikt. De resultaten tonen aan dat met het RATE12 gasfase netwerk zonder de verbeterde fotolyse beschrijving de abundanties van veel N- en C-houdende moleculen heel anders zijn. De nieuwe resultaten worden vergeleken met observationele data en kloppen veel beter.

In Hoofdstuk 4 wordt de chemie van een zuurstof-rijke AGB ster bestudeerd met behulp van een benadering die vergelijkbaar is met Hoofdstuk 3, met onze nieuwe fotolyse beschrijving van N_2 en CO. De gemodelleerde schil is in dit geval dat rond de AGB star IK Tau, waarvoor veel data beschikbaar zijn. Ons verbeterde model van de circumstellaire chemie van Hoofdstuk 3 is gecombineerd met een nieuwe bepaling van de kritische 'moeder-moleculen', bijvoorbeeld de producten van de hoge temperatuur en schokchemie in de binnenste schil die de buitenste schil voeden. De belangrijke vorming en vernietigingsroutes van moleculen in IK Tau zijn geïdentificeerd, en we vinden hogere abundanties van O-houdende moleculen in vergelijking met Hoofdstuk 3, zoals H_2O , OH en NO. De aanwezigheid van verscheidene moleculen die gevormd zijn in de buitenste schillen kan worden gerelateerd aan de abundanties van moeder-moleculen, en kan dus limieten stellen aan hun abundanties door vergelijking met waarnemingen van IK Tau.

In Hoofdstuk 5 zijn toestandafhankelijke snelheidscoëfficiënten voor de experimenteel lastige reactie ($H + OH \rightarrow O + H_2$) berekend. Het omgekeerde $O(^3P) + H_2$ systeem heeft meer dan een halve eeuw in de aandacht gestaan omdat het een belangrijk proces is bij verbranding en een significante rol speelt in warm interstellair gas zoals schokken, wolken die blootgesteld zijn aan UV-straling en de binnenste regionen van protoplanetaire schijven. Ondanks uitgebreid theoretisch en experimenteel onderzoek op $O(^3P)$

+ H₂, zijn er weinig studies gedaan naar de voorwaartse reactie, $\text{H} + \text{OH} (v, j) \rightarrow \text{O} + \text{H}_2$. Nauwkeurige toestandspecifieke snelheidsconstanten van deze reactie, die nodig zijn in astrochemische modellen van dissociatieve schokken en schijven, ontbreken. In dit hoofdstuk worden zeer nauwkeurige *ab initio* potentiële energie oppervlakken gebruikt om quasi-klassieke trajectberekeningen en overgangs-toestand theorie uit te voeren. De berekende toestand-naar-toestand werkzame doorsnedes over een reeks van botsingsenergiën en interne rovibrationele excitatietoestanden worden vervolgens gebruikt om toestand-naar-toestand en thermische snelheidsconstanten te bepalen, inclusief hun temperatuurafhankelijkheden.

De hoofddresultaten van dit proefschrift zijn:

- Hoofdstuk 2. De nieuwe interstellaire N₂ fotolyse snelheid is bepaald met een onzekerheid van slechts 10%, een ordegrrootte beter dan de vorige onzekerheid. Zelf-afscherming en afscherming door H₂ en stof zijn effectiever dan afscherming door H en CO. De overgang van $\text{N} \rightarrow \text{N}_2$ gebeurt bij vrijwel dezelfde diepte in een wolk als dat van $\text{C}^+ \rightarrow \text{C} \rightarrow \text{CO}$.
- Hoofdstuk 3. N₂ en CO zijn meer abundant aan de rand van een circumstellair omhulsel dan voorspeld bij vorige modellen dankzij een juiste behandeling van hun fotolyse processen. De nieuwe beschrijving induceert grote veranderingen in de voorspelde kolomdichtheden (factor 10) en piekstralen van sommige type moleculen (b.v., C_nN en C_nN⁻ koolstofketens) in het model van de koolstofrijke AGB-ster IRC +10216. De nieuwe modellen kunnen direct worden getest met toekomstige ALMA observaties.
- Hoofdstuk 4. De meest abundante dochter-moleculen die geschikt zijn voor toekomstige waarnemingen in de AGB-ster IK Tau zijn geïdentificeerd, gekwantificeerd en geanalyseerd, inclusief alle C-, N-, O-, Si-, S-, P-, Cl- en F-houdende moleculen. De belangrijke moleculaire processen in zuurstofrijke AGB omhulsels zijn fotoionisatie/fotolyse, ion-molecuul reacties en dissociatieve recombinitie. De bovenlimiet op het mogelijke moeder-molecuul CH₄ is $< 2.5 \times 10^{-6}$, gebaseerd op de waargenomen bovenlimieten van de twee dochter-moleculen, C₂H en CH₃OH. Toekomstige waarnemingen van NS en N₂H⁺ kunnen worden gebruikt om de abundanties van moederdeeltjes S en N₂ te bepalen. Tenslotte heeft de snelheid waarmee de AGB ster massa verliest een grote invloed op de berekende abundanties, welke normaal gesproken moeilijk direct te bepalen is met waarnemingen.
- Hoofdstuk 5. Reactieconstanten voor OH in geëxciteerde vibrationele en rotationele toestanden met H zijn ordegrroottes sneller dan de thermische reactieconstanten. Dit moet worden meegenomen in toekomstige astrochemische modellen. Een effectieve barrière kan worden geïnduceerd door de rotationele excitatie bij lagere botsingsenergiën (< 0.6 eV).

De toekomst van astrochemie ziet er goed uit. Dit blijkt uit de snelle vooruitgang in observationele technieken en theoretische en laboratorium fysica en chemie, en hun combinatie in geavanceerde modellen van astronomische objecten. Dit proefschrift tracht een reeks van deze astrochemische aspecten te beslaan. Meer waarnemingen zullen op zich nog meer vragen oproepen, en met verbeterde modellen zullen sommige vragen worden beantwoord. Maar het begrip van deze waarnemingen zal ongetwijfeld verdere inspanningen vragen van chemici om nauwkeurige snelheidscoëfficiënten te bepalen.

Men moet ook verder in de toekomst kijken. Neem opnieuw de Rosetta missie als voorbeeld. Deze missie, meer dan 30 jaar geleden gepland, heeft niet alleen geholpen in het beantwoorden van vele interessante astrochemische vragen maar heeft ook bewezen dat (vrijwel) alles is mogelijk in de toekomst zolang men een langetermijn visie heeft. Dit geldt met name voor de astrochemie.

