



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

中文结论

C.1 分子的宇宙

宇宙广袤无垠，但很多我们在夜空中看到的物体——行星、恒星和星系——实际上源自于原子和分子之间的微观化学反应过程。原子与分子辐射的各种光谱谱线，可以通过灵敏的望远镜探测到。所以，天文学家能够“以小窥大”——通过研究分子来研究宇宙——从分子的尺度以及其相互作用的层面上。这需要天文学和化学物理（或者物理化学）两方面的知识。这种研究，刺激了近年来天体化学的迅速发展。从理论上讲，天体化学这门学科，可以从量子力学的高度上回答我们对宇宙的各种问题——这是多么让人振奋啊！宇宙的本质很可能是量子的！从这个角度来说，我们处在一个“分子的宇宙”中 (Tielens 2013)。

迄今为止，宇宙空间中已有近 180 个不同的分子（不包括同位素）被探测并识别。这主要是通过它们的转动、振动以及电子光谱实现的^b。其中包括小分子，如 CO 和 H₂O 分子，以及大分子，如多环芳香烃 (PAHs)，以及富勒烯，例如 C₆₀⁺、C₆₀ 和 C₇₀。现在已经知道，分子普遍存在于中性星际介质的所有阶段，从弥漫云到致密分子云再到致密恒星——最后到行星形成的区域，从处于死亡阶段的恒星的包层到星系的中心区域。而且，分子在这些地方的丰度还比较高。这些分子以及它们的化学属性为我们探索恒星、星团、星系、以及星际物过去和未来，打开了一扇窗口，既包含其物理属性，亦包含其化学属性。这是因为，分子的激发和丰度取决于它们之间的碰撞，而碰撞又对气体的密度和温度以及其周围环境的辐射场非常敏感 (van Dishoeck 2014)。因此，分子是宇宙中星体或者其它物理环境的“染料”(或者说“失踪器”)。

宇宙中其它地方很可能存在着生命。那些生命诞生的第一个步骤，很可能是一些被称作“生命起源以前的星际分子”的诞生过程。其后，这些分子之间的相互作用形成更为复杂的结构。我们人类在这个宇宙中并不孤独——至少从我们的构成来看是这样的。因为，从目前的研究成果来看，组成我们的所有分子，和组成宇宙中分子云、行星、恒星、星云，以及其它很多不同状态物体的分子，是没有什么太大的区别的。这意味着，天体化学的研究，不但能够帮助我们更好的理解我们所居住的行星以及太阳系的起源以及演化，最终肯定也能帮助我们更好的理解“生命”的起源以及未来，其中当然包括我们“人类”自己的过去和将来。因此，近年来，天体化学引起了越来越多的学者的研究兴趣，并得以迅速发展。

C.2 天体化学的黄金时代

天体化学，也被称作分子天体物理学，是研究发生在整个宇宙中的丰富多样的化学的一门学科 (Herbst & Yates 2013)。具体来讲，它是研究“分子在天文环境中的形成、解离、激发以及其对天文学研究对象的结构、动力学、以及演化的影响的一门学科”(Dalgaro 2008)。得益于迅速发展的科学技术，如今，我们生活在研究天体化学的黄金时代。

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

新的望远镜的应用推动了天文观测领域的显著进步。例如，许多分子在远红外波段的速度可分辨光谱用地球上的望远镜是观测不到的。如今，天文学家却已经获得了这样的数据，尤其是 H_2O 分子的光谱——借助于太空中的远红外望远镜，即赫歇尔空间天文台 (Herschel Space Observatory)，详见 Pilbratt et al. (2010); de Graauw et al. (2010)。

天体化学在未来十年内的发展必将突飞猛进，尤其是因为得益于地球上目前为止最强大的望远镜——阿塔卡玛大型毫米波天线阵 (Atacama Large Millimeter/submillimeter Array，缩写为 ALMA，简称阿尔马) 良好运行。与以前的望远镜相比，ALMA 在灵敏度和空间分辨率方面都有了巨大的提高。另外，其它太空望远镜，例如，詹姆斯·韦伯空间望远镜 (James Webb Space Telescope，缩写为 JWST)，以及未来的 30—40 米类的欧洲极大望远镜 (European Extremely Large Telescope，简写 E-ELT)，使得天文学家对所观测的天体对象的直接成像成为现实，可以从光谱和空间两方面来加以研究。毫无疑问，天体化学领域的某些进展将超过我们目前的想象。已经发生的例子，就是罗塞塔号计划 (Rosetta mission)。

罗塞塔号取得的巨大成功是天文学领域的一个重大里程碑，已经被载入史册。简言之，罗塞塔号是欧洲空间局组织的机器人空间探测器计划，它将一颗人类制造的卫星成功发射到了彗星表面，使得那颗卫星和彗星一起在宇宙中漫游，并将该彗星的组成、结构等各种数据和图像源源不断的发射回地球，供天文学家研究。这些数据包括组成彗星的各种小分子和复杂的有机分子。那颗卫星的名字叫做 67P/楚留莫夫 - 格拉希门克 (67P/Churyumov-Gerasimenko)。这在人类探索宇宙的道路上是一大壮举。即使是资深天文学家，只有在看到了这颗卫星和它所携带的登陆机器人 (名称为 Philae) 发送回地球上的清晰的视频和图片资料的时候，才相信了这个事实。罗塞塔号反馈给我们的是非常珍贵的资料——关于我们所生活的太阳系起源的信息，这是因为彗星是太阳系中最古老的存在之一。

从化学物理 (或者物理化学) 的角度来讲，天文学家需要很多化学反应的精确的反应速率。大部分这样的数据已经从实验中得到了测量，并且/或者从理论方面计算得到。计算方面，比较典型的方法有基于精确从头算 *ab initio* 势能面的准经典轨线计算方法和量子力学方法 (或者两者混合的计算)。它们都极大受益于计算能力不断强大的 (超级) 计算机，以及新的算法。

旨在支持不同类型天体化学模拟的化学网络数据库已经建成并被广泛使用。这种数据库需要不断的维护和更新。目前为止，使用最广泛的数据库是 UMIST (UDfA, McElroy et al. 2013)，也被称作 RATE12。这个数据库已经有近 30 年的历史，有不同的版本，每个版本包含的化学反应的数目和分子不太一样。目前为止，已经升级到第五版，包含 6173 种化学反应和 467 个分子。这些数据库在模拟不同天体的物理或者化学性质的时候非常有用，比如暗云、原行星盘系统、恒星包层等。

现代化学物理 (或物理化学) 和天体化学实际上彼此支持，彼此促进，使得这两个领域的前途都非常光明。

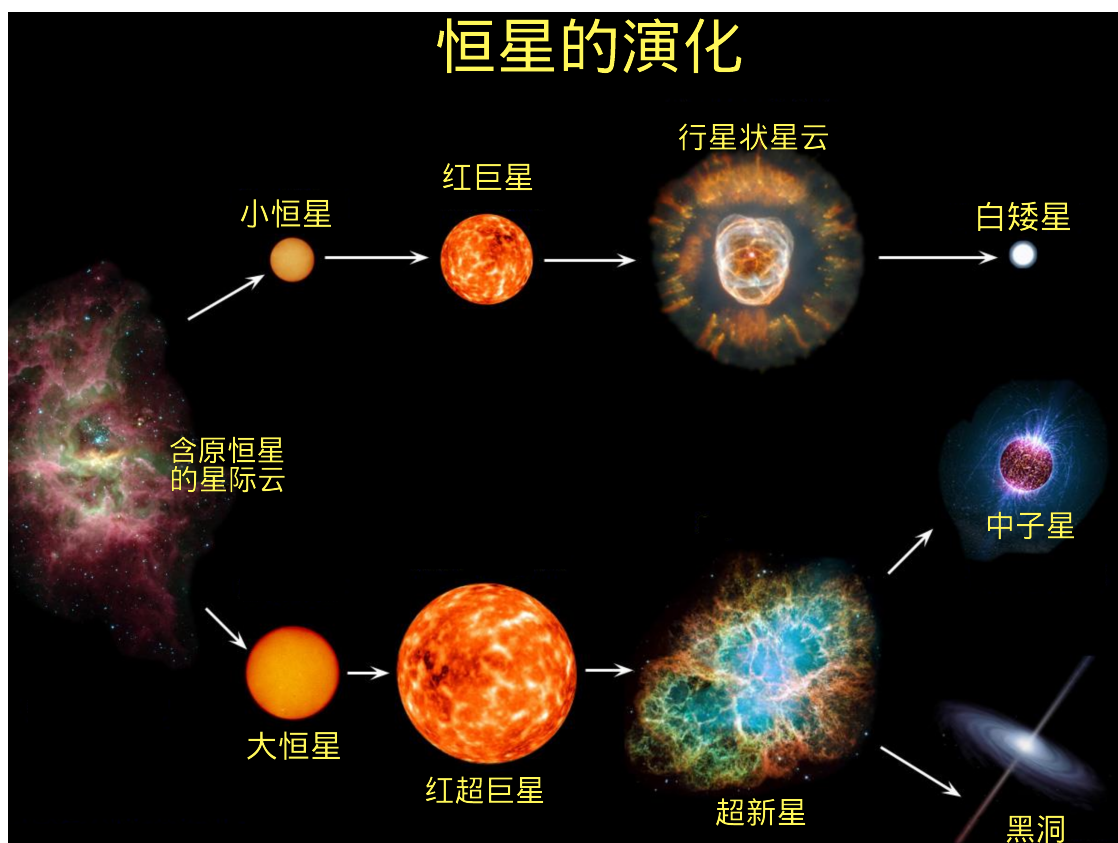


图 C.1 — 恒星的演化过程，很大程度上取决于其质量的大小。质量小的恒星最终可能会演化为一颗白矮星，而质量大的恒星可能会演化为一颗中子星或者黑洞。该图是从 E. Moravveji 博士提供的原图的基础上翻译而成。

C.3 恒星的形成、演化和命运

我们知道，恒星诞生于致密分子云。但是，为了形成一颗普通的恒星，分子云必须坍塌。这可以由外力或由它们自身的引力作用来诱导完成。举例来说，如果分子云足够接近一个巨大的超新星，其外部压力可能会导致分子云坍塌。两个致密分子云也可以因为万有引力的原因相互碰撞。还有，两个星系如果碰撞，瞬间就可能导致很多恒星的产生。

图 C.1 给出了恒星的演化过程。一旦恒星从分子云中产生，其演化过程在很大程度上取决于其初始质量的大小。低质量（或者说小）恒星，特别是那些质量小于 $8 M_{\odot}$ 的恒星，会变成红巨星，再变成行星状星云，最后演变为一颗白矮星。而高质量（或者说大）恒星则会演变为红超巨星，再变为超新星，最后终结为一颗中子星或者黑洞。恒星在这些演变过程中的很多细节还不清楚，尤其是高质量恒星的演化过程。目前只是知道它们发生在团簇状的天体物理环境中。本文的讨论重点是低质量的恒星的诞生和死亡过程中的分子的化学性质。天文学家们对这个领域有着比较成熟的理解。

低质量的恒星的形成可分为几个不同的演化阶段。从坍塌的暗云形成星核到形成行星状星云，再到可以形成行星系统的含有盘系统的早期主序星阶段，大致需要几百万年的时间。最终，盘系统也会消失，只留下一颗年轻的恒星，它的周围残留着很小一部分的宇宙尘埃。我们的太阳系已经经历了这个过程。目前，太阳系的寿命已经有四十六

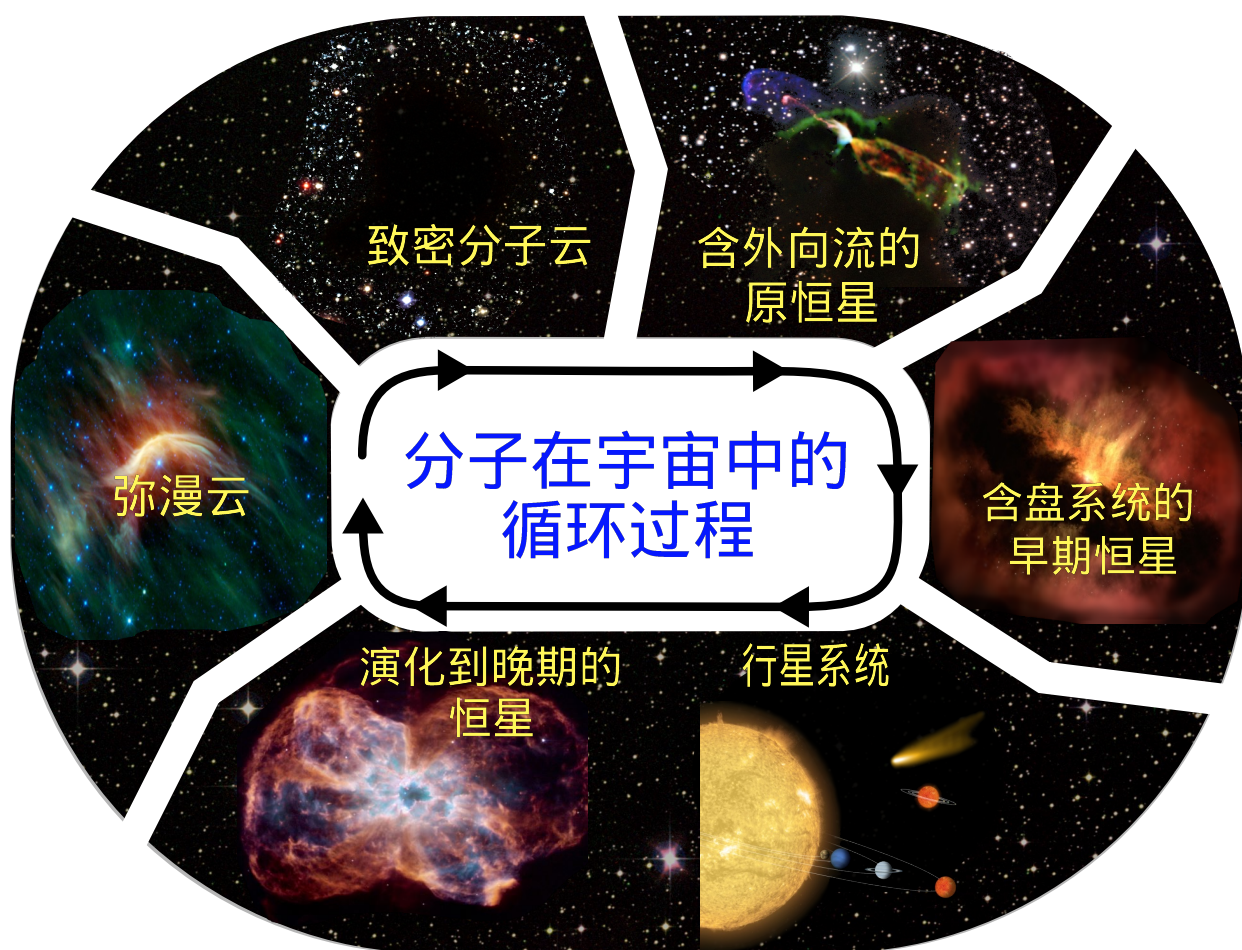


图 C.2 — 分子在宇宙中的循环过程。该图是 M. Persson 博士为 van Dishoeck (2014) 的综述文章所设计的插图，原图的示例文字采用的是英文。本人对该图进行了改进，并翻译成了荷兰文和中文两个版本。

亿年了，却任带有它最初从分子云中形成时的印记。

宇宙中分子云的引力坍缩释放热量，增加原恒星的温度，诱导氦核聚变。之后发生的是氢核聚变。氢核聚变让恒星长期稳定的处于主序星阶段。当核聚变耗尽燃料之后，低质量的恒星最终会变成白矮星。恒星演化后期，最重要的阶段之一是渐近巨星分支 (AGB) 阶段。天文学家对 AGB 恒星尤为感兴趣。这是因为，这种恒星不断向其周围喷射气体分子和宇宙尘埃，于是形成了一个温暖而致密的包层 (CSE)。这个过程包含了复杂的物理化学反应，能生成新的分子，而且将星际气体和尘埃返还给星际介质 (ISM)，从而导致新的分子云的产生，而这些分子云将重新孕育新的恒星，从而进入下一轮恒星的演化过程。如此，周而复始，不断循环，见示意图 C.2。

C.4 该博士毕业论文的主要内容及展望

本毕业论文探讨了在恒星形成和死亡过程中，星际分子和恒星包层中的分子的化学性质。论文主体用英语写成，主要结论翻译成了中文和荷兰文。该论文的第一章是研究综述，包含研究背景和主要结论。第二到第五章则是各个子课题的研究细节。这里，我们概括一下本论文最主要的工作和发现。从化学物理或者物理化学的角度来看，该论文

最重要的贡献在于，我们首次精确研究了两个重要的化学反应速率：一个是 N_2 的光解速率。为了这个目标，物理化学家和天文学家已经合力奋斗了二十年左右。现在终于得以实现。另一个是 H 原子与 OH 分子的反应，本文精确计算了态-态反应速率以及热速率常数。从天文学的角度来看，我们发展了新的、精确的计算分子屏蔽函数的方法，解决了红巨星包层模拟中一个存在了很久的的问题。使用新的模型和算法，我们模拟了两颗典型的红巨星包层中的分子的分布。这些结果是到目前为止该领域最精确的数据。它们为未来的天文观测提供了直接的依据。

在第二章中，我们研究得到了 N_2 分子在星际中的精确光解速率。氮是宇宙中含量最高的元素之一。N 原子与 N_2 之间的相互转化，控制着更为复杂的含 N 元素的分子的形成过程。在任何有强 UV 光子的星际区域中，光解是 N_2 分子最主要的解离过程。基于分子的高精度光谱，使用我们的天体化学模型，以及精确的 H 和 H_2 分子的高精度光谱，我们计算了不同辐射场、不同温度、不同宇宙环境中的精确的 N_2 分子的光解速率以及屏蔽函数。同时，使用不同的天体化学 $N \rightarrow N_2$ 在光解占主导的区域以及其它天体物理环境中的转化过程。这样，我们发现了一些非常有趣的现象。比如，我们发现以前所报道的探测到的 N_2 分子的吸收光谱可能是不可靠的（他们的结果是发表在《自然》杂志上的）。

在第三章中，我们将第二章中所计算得到精确的 N_2 光解速率应用到了一个富含碳的红巨星（IRC+10216）模型中，重新研究了这颗恒星周围的气体分子的分布和化学性质。这颗星是离地球最近的渐近巨星分支恒星，它是远红外波段天空中最亮的物体，并且也是所含分子种类最丰富的天体对象之一。根据对天体化学模型中用到的庞大的化学网络的敏感性分析，氮分子的光解过程，即 $N_2 + h\nu \rightarrow N + N$ ，是整个化学网络中最重要反应之一。然而，该反应从来没有被正确研究过。本文中，我们除了采用了最新报道的 N_2 和 CO 的光解速率以及屏蔽函数，还发展了一种全新的采用分子屏蔽函数的方法。这种方法在各向异性的星际辐射场中，考虑来自各个方向的光子对光解速率的影响。也就是说，是完全三维的处理方法。同时，我们还采用了最新发布化学网络的数据库，即 RATE12 气相反应网络。做了这些改进之后，我们发现，很多含 N 和含 C 的分子的丰度和化学反应都和以前有所不同。我们把最新的结果与天文观测得到的数据进行了比较。

在第四章中，我们采用与第三章类似的模型，研究了一颗富含氧的红巨星。具体而言，我们研究的恒星是 IK Tau。近年来，关于这颗恒星的高精度天文观测已经有很多报道，但是模拟方面所能参考的数据却是二十年以前的，很不准确。本文研究中，我们遴选了目前为止最精确的天文观测方面的数据，以及各种理论研究的核心结论，辅以我们所开发的全新的模型，最大程度上准确研究了这颗恒星包层中子分子的形成和解离过程，并找出了丰度最高的子分子。这项研究对以后的天文观测非常有用。与第三章不同的是，这里丰度最高的分子是含氧元素的分子，比如 H_2O 、OH 和 NO。某些子分子的丰度与它们的母分子的丰度是紧密相关的，因此我们能够根据子分子的丰度来间接研究母分子的丰度。

在第五章，我们计算了实验上很难研究的基元反应 $H + OH \rightarrow O + H_2$ 的态-态分辨速率系数。这个反应的逆向反应 $O(^3P) + H_2$ 已经被研究了超过半个世纪，这是因为这个过程不仅属于燃烧化学，而且在高温的星际气体中，如激流、强紫外辐射场中的星际云、以及原恒星的盘系统区域中，都起着一个非常重要的作用。尽管理论和实验对

$O(^3P) + H_2$ 的研究颇多, 却鲜有关于其正向反应, $H + OH(v, j) \rightarrow O + H_2$ 的研究。天文学家在研究离解的激流和盘系统中, 必须用到该反应的态-态反应速率。然而, 这些数据却从未被报道。在本章中, 我们基于高精度的从头算 (*ab initio*) 势能面, 用准经典轨线方法和各种过渡态理论方法研究得到了这些必须的数据。我们首先计算了不同碰撞能下的振转激发态的态-态反应截面, 然后推导出了态-态反应速率以及热速率常数。

本论文的主要结果概括如下:

- 第二章: 计算了 N_2 分子的精确的光解速率, 误差被控制在 10% 以内, 该误差比以前所使用的数据的误差减小了一个数量级。对 N_2 分子而言, 自我屏蔽 (self-shielding)、星际尘埃屏蔽、以及 H_2 分子的屏蔽作用远比 H 原子和 CO 分子的屏蔽更有效。在星际云中, $N \rightarrow N_2$ 与 $C^+ \rightarrow C \rightarrow CO$ 的转化几乎发生在同一深度。
- 第三章: 提出了一种精确计算分子自我屏蔽以及多重屏蔽函数的方法, 并采用这种方法研究了一颗富含碳的红巨星包层中分子的分布。对于 N_2 和 CO 分子在红巨星包层边缘的丰度而言, 新模型预示的结果比以前的预示结果高出很多。对于 IRC +10216 这颗红巨星而言, 我们所采用的对分子光解速率的精确求解过程, 导致了某些分子 (例如, C_nN 和 C_nN^- 碳链) 的柱密度和峰值半径的显著变化 (十倍左右)。这些新的结果可以通过未来的 ALMA 的观测直接加以证实。
- 第四章: 对于富含氧的红巨星 IK Tau, 我们识别、量化和分析了丰度最高的子分子, 包括所有含 C-, N, O, Si, P, S, Cl, 和 F 的分子。这些分子最有可能在未来的天文观测中被识别出来。富含氧的红巨星包层中, 最关键的分子反应过程是光电离和光解, 离子-分子反应, 和分离性重组 (dissociative recombination)。 CH_4 有可能是一个母分子。在模拟中, 我们根据 CH_4 的两个子分子 (C_2H 和 CH_3OH) 在天文观测上的上限, 获得了其丰度上限, 为 $< 2.5 \times 10^{-6}$ 。如果将来能够观测和识别出 NS 和 N_2H^+ , 我们就能间接模拟出它们的母分子 (S 和 N_2) 的丰度。最后, 恒星的质量亏损速率是很难从天文观测中直接获得的。然而, 它在模拟分子的丰度的过程中有着很重要的作用。
- 第五章: 基元反应 $H + OH \rightarrow O + H_2$ 的振动激发和转动激发的速率常数比其热速率常数高出好几个数量级。这在天体化学模型中需要被考虑进去。低能碰撞 (< 0.6 eV) 的情况下, 转动激发可能导致该体系产生了一个有效势垒。

毫无疑问, 天体化学领域的前景是一片光明的。这是因为, 天文观测技术与物理化学 (理论和实验) 领域的迅速发展, 为复杂的天体化学模型提供了必要的支持。本文试图涵盖天体化学在这些方面所取得的成就。随着更多观测结果的出现, 以及人们对天体对象的理解的不断加深, 一定会有新的问题浮现出来。同时, 不断改进的天体化学模型, 能帮助我们理解一部分新出现的问题。但是, 解释新的观测结果, 无疑会需要物理化学家们做出更多的努力, 提供天体化学研究中所必须的精确的反应速率系数。

对于未来, 我们必须努力看得更远。再次拿罗塞塔号 (Rosetta) 机器人空间探测器计划为例来说明。30 年之前制定的这个计划, 不但有助于研究和理解许多有趣的天体化学方面的问题, 而且也证明了 (几乎) 任何事情都是有可能发生的——从长远的角度来说! 对人类唯一的限制就是我们的想象力——这种说法是非常有道理的, 尤其是在

迅速发展的天体化学领域。

