



Universiteit  
Leiden  
The Netherlands

## Electronic spectroscopy of molecules of astrophysical interest

Bacalla, X.

### Citation

Bacalla, X. (2019, July 2). *Electronic spectroscopy of molecules of astrophysical interest*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/74478>

Version: Not Applicable (or Unknown)

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

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/74478>

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

Cover Page



Universiteit Leiden



The following handle holds various files of this Leiden University dissertation:

<http://hdl.handle.net/1887/74478>

**Author:** Bacalla, X.

**Title:** Electronic spectroscopy of molecules of astrophysical interest

**Issue Date:** 2019-07-02

# Samenvatting

Het jaar 2019 markeert het eeuwfeest van de ontdekking van de diffuse interstellaire banden of DIB's. De oorsprong van deze circa 500 absorptiesignalen die zichtbaar zijn in de spectra van sterrenlicht dat interstellaire wolken van gas en stof doorkruist zijn sindsdien een raadsel gebleven voor astronomen. Door de jaren heen zijn er verschillende voorstellen gedaan voor de absorbers of 'dragers' die de DIB's veroorzaken, van microscopische stofdeeltjes tot moleculen, zowel groot als klein. De meest waarschijnlijke dragers onder deze kandidaten zijn families met lange koolstofketens en ringen, polycyclische aromatische koolwaterstoffen (PAK's) en fullerenen. Deze consensus is het resultaat van de gezamenlijke inspanning van astronomen, experimentalisten, theoretici en modelleerders. In 2015 werden twee (tot vijf) DIB's toegeschreven aan het buckminsterfullerene-kation  $C_{60}^+$ , dat onlangs werd bevestigd middels waarnemingen vanuit de ruimte. Deze ontwikkeling blaast het DIB-onderzoek nieuw leven in en brengt ons dichterbij het volgende stuk van de puzzel.

In dit proefschrift worden de elektronische spectra van koolstofketens gemeten en geanalyseerd in het laboratorium om verder inzicht te verschaffen in de aard van de DIB-dragers en van de omgevingen waar ze zich bevinden.

Hoofdstuk 2 beschrijft de experimentele technieken die zijn gebruikt bij het opnemen van spectra specifiek voor de studie van radicale koolstofketens. Dit zijn namelijk Incoherent Broadband Cavity-Enhanced Absorption Spectroscopy (IBBCEAS) en Cavity Ring-Down Spectroscopy (CRDS). De twee methoden worden op een complementaire manier gebruikt; de snelle gegevensacquisitie en grote golfengteafdekking van IBBCEAS samen met de hoge resolutie van CRDS zorgen voor een efficiënte werkwijze en identificatie van [nieuwe] spectrale kenmerken die direct kunnen worden vergeleken met astronomische DIB-spectra. Tevens worden details over de synthese van moleculen in koolwaterstof plasma expansies verkregen.

Hoofdstukken 3 en 4 richten zich op het hexatriynylradicaal,  $C_6H$  en zijn zwaardere isotopoloog,  $^{13}C_6H$ . Deze  $C_6H$  koolstofketen werd voor het eerst in de ruimte gevonden zelfs voordat de spectra in het laboratorium werden gemeten met millimetergolfspectroscopie. Ondanks het feit dat de spectra niet voldoen aan de criteria voor een DIB-drager, zijn de elektronische spectra van dit molecuul rijk aan informatie.

Deze is ontrafeld met behulp van CRDS met hoge resolutie, en biedt inzicht in hoe bijvoorbeeld bandprofielen kunnen veranderen als gevolg van subtiele intramoleculaire interacties. In deze hoofdstukken wordt de elektronische oorsprongsband van  $^{13}\text{C}_6\text{H}$  gerapporteerd en een uitgebreid energieniveauschema voor  $\text{C}_6\text{H}$  geformuleerd op basis van rovibronische toewijzingen en literatuurgegevens (mm-golf, matrix isolatie en holle-kathodespectra, ab-initio-berekeningen en isotoop substitutie). Bovendien wordt een Renner-Teller-analyse beschreven om de verschillende elektronische overgangen uit te leggen en toe te wijzen.

Tenslotte worden in Hoofdstuk 5 elektronische overgangen van het hydroxylation  $\text{OH}^+$  gezocht in astronomische spectra uit de ESO Diffuse Interstellar Bands Large Exploration Survey (EDIBLES). De interstellaire abundantie van  $\text{OH}^+$  wordt gekwantificeerd en daaruit wordt de efficiëntie van kosmisch straal ionisatie (CRI) in transparante interstellaire wolken afgeleid. Deze parameter is vooral belangrijk voor het modelleren van de chemische evolutie van verschillende interstellaire moleculen in deze omgevingen, waaronder de moleculaire DIB-dragers. Het is gebleken dat de percentages hoger zijn dan wat eerder was afgeleid uit submillimeter, infrarood en UV-waarnemingen. Dit komt door een herziene formulering van de  $\text{OH}^+$  abundantie in verband met een CRI-efficiëntierelatie met behulp van bijgewerkte oscillatorsterktewaarden voor de  $\text{OH}^+$  overgangen. Het is echter mogelijk dat deze zichtlijnen inherent hoge concentraties van  $\text{OH}^+$  hebben en dus leiden tot een hoog percentage CRI. Desalniettemin dienen de resultaten als een complementaire controle op andere methoden voor het afleiden van de CRI-efficiëntie die afgeleid zijn van op grond gebaseerde waarnemingen van meervoudige  $\text{OH}^+$  overgangen in het UV.

Al met al is de identificatie van de DIB-dragers net zo belangrijk als voorheen, zeker nu  $\text{C}_{60}^+$  een DIB drager blijkt te zijn. De identificatie van de DIB-dragers kan licht werpen op ons Galactische koolstofbudget, omdat meerdere van de DIB onderzoeken duiden op DIB dragers met een koolstofbasis. Het gebruik van een snelle en gevoelige spectrometer om verschillende koolstofgebaseerde gasmengsels te onderzoeken, zal dus zeker helpen bij het screenen van potentiële kandidaten. Hoge-resolutiespectra zullen ook nuttig zijn om meer over het molecuul zelf te leren, en spectroscopische constanten die daarvan zijn afgeleid, kunnen worden gebruikt voor het simuleren van spectra voor verschillende interstellaire omstandigheden. Ten slotte kunnen andere bekende moleculen worden gebruikt als probes voor de fysi-chemische eigenschappen van DIB-drageromgevingen.

In ons streven om de oorsprong van DIBs te ontrafelen, kunnen we gelijktijdig meer leren over het interstellaire medium in onze Melkweg.