



Universiteit
Leiden
The Netherlands

PAH processing in space

Micelotta, E.R.

Citation

Micelotta, E. R. (2009, November 12). *PAH processing in space*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/14331>

Version: Corrected Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/14331>

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

Nederlandse samenvatting

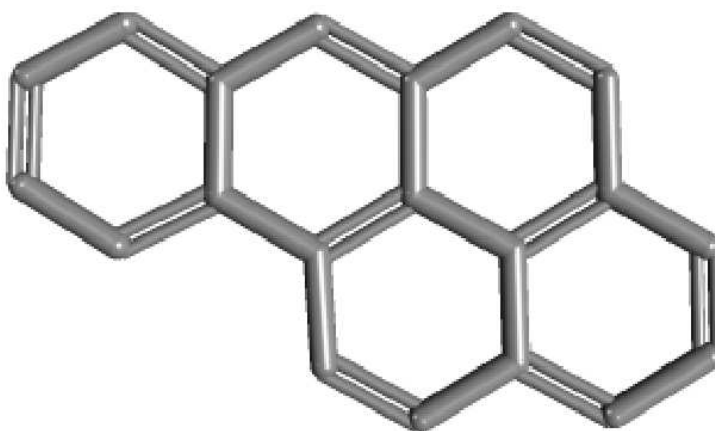
Dit proefschrift beschrijft onderzoek naar de fysische processen die polycyclische aromatische koolwaterstoffen (of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, PAHs) ondergaan tijdens hun reis door de ruimte.

PAH-verbindingen zijn in grote mate aanwezig op aarde. Ze komen van nature voor in ruwe olie en kolen als product van de chemische omzetting van natuurlijke grondstoffen, en worden tevens gevormd bij de onvolledige verbranding van koolstofhoudende brandstoffen zoals hout, kolen, diesel, vet, tabak en wierook. Zodoende zijn PAHs aanwezig in uitlaatgasen van auto's, sigarettenrook en (te ver) gebakken vlees. Dit alles maakt de groep van PAHs een van de meest verspreide organische vervuilende stoffen die vaak de aandacht van de media trekt, omdat ontdekt is dat sommige soorten PAHs carcinogene, mutagene en teratogene eigenschappen hebben. Vooral de PAH-verbinding benzo[a]pyreen (Fig. 1) is bekend omdat het de eerst ontdekte chemische kankerverwekkende stof (carcinogeen) is, en één van de vele carcinogenen die voorkomen in sigarettenrook.

Onderzoek heeft aangetoond dat PAHs veel voorkomen in de ruimte en dat ze een belangrijk deel uitmaken van het Interstellair Medium (ISM). Ze zijn nauw verwant aan stof en worden gevormd in de gasuitstroom van geëvolueerde en stervende sterren. PAHs dragen substantieel bij aan de opwarming van het ISM en spelen een cruciale rol in de interstellair chemie en in de kosmische levenscyclus. Bovendien kunnen ze gebruikt worden voor de bepaling van omgevingscondities in astrofysische objecten.

Het Interstellair Medium en de kosmische levenscyclus

Met de term Interstellair Medium (ISM) wordt, zoals de naam al suggereert, de materie bedoeld die de ruimte tussen de sterren in een sterrenstelsel vult. Het ISM bestaat voornamelijk uit ijl waterstof- en heliumgas, en een klein aandeel zwaardere elementen die als gas (atomair of moleculair) of als vaste stof aanwezig kunnen zijn. Het ISM is onderverdeeld in een aantal fasen die elk specifieke eigenschappen hebben. De verschillende **fasen** en **componenten** van het ISM zijn niet statisch en geïsoleerd van elkaar, maar zijn voortdurend in interactie door de kosmische levenscyclus, zoals hieronder beschreven en samengevat in Fig. 2. Het verhaal van een nieuwe ster begint in de donkere, koude kernen van compacte **moleculaire wolken**. Zolang de druk het effect van de zwaartekracht kan compenseren is een wolk stabiel. Maar zodra de massa van de kern boven een kritische waarde komt, zal de gravitatie de magnetische/turbulente druk overwinnen, en zal de kern ineenstorten. Als de temperatuur en de dichtheid hoog genoeg zijn om de omzetting van waterstof in helium (ook wel kernfusie of verbranding genoemd) te initiëren, is er een nieuwe ster ontstaan. Hebben we te maken met een ster van lage of gemiddelde massa, dan zal de energie die vrijkomt bij de kernfusie voorkomen dat de ster verder ineenstort tijdens de lange ($10^7 - 10^{10}$ jaar), stabiele 'hoofdreeks'-levensfase. Kernreacties in deze sterren kunnen nieuwe elementen vormen tot aan koolstof, zuurstof en stikstof. Na het verlaten van de hoofdreeks zal de ster uiteindelijk op de asymptotische reuzentak (Asymptotic Giant Branch, AGB) komen. In deze fase zijn de buitenste lagen slechts losjes gebonden aan de stellaire kern, en thermische instabiliteiten zorgen ervoor dat het kern-



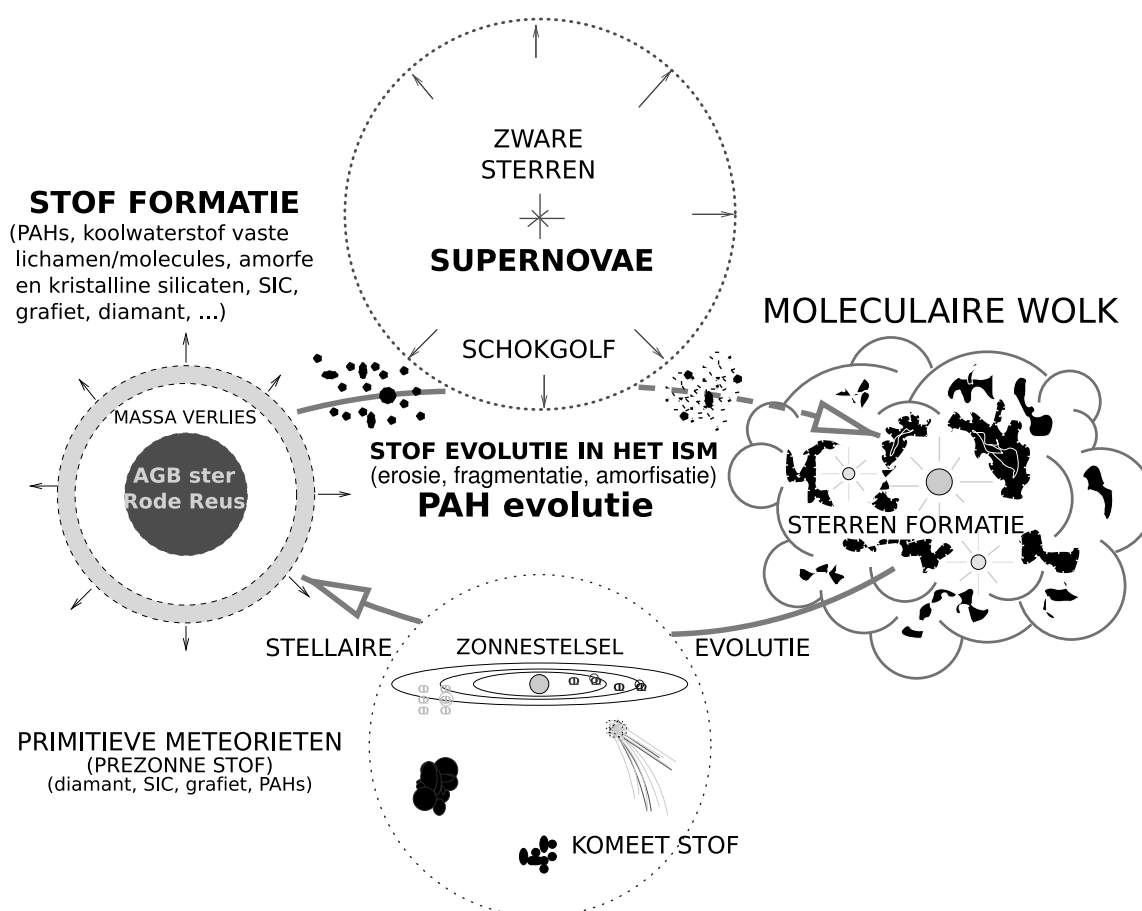
Figuur 1 — Het PAH-molecuul benzo[a]pyreen, het eerst ontdekte chemische carcinogeen, en één van de vele carcinogenen die gevonden zijn in sigarettenrook.

materiaal (koolstof en zuurstof) zich vermengt en naar de oppervlakte komt. Uiteindelijk zal de buitenste laag (envelop) in zijn geheel afgestoten worden, zodat de uitgestrekte nevel rond de ster wordt blootgesteld aan de straling van de hete ioniserende kern. Het resultaat is een planetaire nevel. Zonder verdere verbranding zal de kern uiteindelijk afkoelen en eindigen als een witte dwerg.

De evolutie van een zware ster ($M_* > 8 M_\odot$) verloopt heel anders. Zware sterren verbruiken hun brandstof veel sneller dan lichte sterren. Bovendien zijn ze in staat koostof en zuurstof om te zetten in zwaardere elementen, tot aan ijzer. Verdere verbranding is niet mogelijk omdat de reactie dan endotherm zou zijn, en uiteindelijk stort de kern ineen terwijl de buitenste lagen exploderen: de ster is dan een type II Supernova. De explosie kan de ster totaal verwoesten, of een neutronenster of pulsar achterlaten. Explosieve nucleosynthese kan plaatsvinden tijdens de laatste fases van de ster, zodat elementen zwaarder dan ijzer gevormd worden die vervolgens in het ISM geïnjecteerd worden.

Gedurende hun leven beïnvloeden sterren hun omgeving in sterke mate, en hun levenscyclus is nauw verbonden met de fysische en chemische evolutie van de materie van het ISM. Ioniserende fotonen van O- en B-sterren (zware, hete, heldere sterren) creëren HII-gebieden (**warm geïoniseerd gas**) en kunnen **interstellaire moleculen** vernietigen. De meerderheid van de zwaardere elementen die gemaakt zijn door sterren, wordt in het ISM geïnjecteerd in de vorm van kleine vaste **stofkorrels**, die voornamelijk gevormd zijn in de expanderende koelende gasuitstroom van geëvolueerde of stervende sterren (AGB en RGB), mogelijk in de uitstoot van supernovae (maar de hoeveelheid stof gevormd in SN is niet goed bekend), en in mindere mate in superreuzen, Wolf-Rayet sterren en novae. Naast stofdeeltjes bevat de uitstoot van geëvolueerde sterren en supernovae ook verschillende moleculen, van de meest simpele zoals CO tot veel complexere zoals afgeleiden van acetyleenketens (bijvoorbeeld HC_7) en **Polycyclische Aromatische Koolwaterstoffen (PAHs)**.

Na de injectie in het ISM door sterrewinden of explosies kan het nieuwgevormde sterrenstof en moleculen vele malen de cyclus doorlopen, met afwisselende fasen tussen de wolken in (**warm neutraal gas**) en in de wolk zelf (**koud neutraal gas**). Door UV-straling in het diffuse ISM, bombardering door **kosmische stralen** en reacties met ionen worden moleculaire verbindingen voortdurend vernietigd en opnieuw gevormd, zodat alleen de meest stabiele stoffen kunnen overleven. In het warme geïoniseerde medium (**Warm Ionized Medium (WIM)**) wordt



Figuur 2 — Een schematisch overzicht van de kosmische levenscyclus. *Figuur aangepast van Jones (2004).*

stof voornamelijk bewerkt door sterke **schokgolven** veroorzaakt door **supernova-explosies**. Door botsingen met energetische ionen in het hete geschokte gas kunnen atomen van de stofkorrels afspatten, terwijl botsingen tussen stofdeeltjes met hoge snelheden kunnen leiden tot verdamping, smelten, fase-overgangen en vernietiging van de botsende partners. De energie die aan het gas wordt meegegeven door supernova-explosies veroorzaakt een aparte fase van het ISM, het hete geïoniseerde medium tussen de wolken (**Hot Ionized/Intercloud Medium (HIM)**), gekenmerkt door lage dichtheid en hoge temperatuur. In de dichtere gebieden - diffuse compacte wolken - zijn de fysische condities zodanig, dat stoffen in de gasfase op stofkorrels kunnen neerslaan en zo een mantel vormen.

De moleculaire wolken waarin stof en moleculen bestaan, kunnen gravitationeel onstabiel worden en instorten, zodat een nieuwe generatie sterren geboren wordt van welke de chemische samenstelling bepaald wordt door de vorige sterpopulatie. Protoplanetaire schijven worden mogelijk gevormd rond sterren van lage massa, en waarschijnlijk verdampen alle interstellaire stofkorrels volledig, om daarna opnieuw gecondenseerd te worden als condensaten in een zonnestelsel. De cirkel is gesloten en de cyclus begint opnieuw.

Polycyclisch Aromatisch Koolwaterstoffen (PAHs)

Zoals eerder vermeld, heeft het interstellaire medium naast stofdeeltjes ook een populatie grote moleculen die algemeen aangeduid worden als Polycyclische Aromatische Koolwaterstoffen

(Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, PAHs). Deze classificatie is vastgesteld door het analyseren van de infrarood (IR)-emissie van verschillende soorten objecten. Het IR-spectrum van de meeste objecten, van individuele HII-gebieden en reflectienevels tot galactische kernen en hele sterrenstelsels, wordt gedomineerd door brede infrarode emissie-karakteristieken die sterke overeenkomsten vertonen met de eigenschappen van emissiekarakteristieken van PAHs. Deze emissiebanden komen voort uit het vibrationele relaxatieproces van PAH-soorten die bestaan uit zo'n 50–100 koolstofatomen, en geëxciteerd zijn door FUV-fotonen. Met een zeer hoge abundantie van $\sim 10^{-7}$ ten opzichte van waterstof bevatten PAHs 10% van het elementaire koolstof en vertegenwoordigen ze een belangrijke component van het ISM.

Interstellair PAHs worden vaak geassocieerd met stofkorrels, aan de ene kant omdat ze gevormd worden als bijproduct van formatie van koolstofhoudend stof, aan de andere kant omdat het er inderdaad op lijkt dat ze een aansluiting vormen van op de grootte-verdeling van interstellair stofkorrels richting het moleculaire domein. Sommige eigenschappen van stofkorrels, zoals de elektrische lading, kunnen redelijkerwijs geëxtrapoleerd worden naar PAHs als een paar details worden meegenomen die gerelateerd zijn aan hun geringe grootte. Toch is het belangrijk te onthouden dat PAHs moleculen zijn, en dat de benadering vanuit de vaste stof fysica zoals toegepast op stofkorrels (zoals bijvoorbeeld botsingsprocessen in schokgolven) niet gebruikt kan worden voor moleculen omdat hun fysica en chemie op vele manieren verschillen van die van stof.

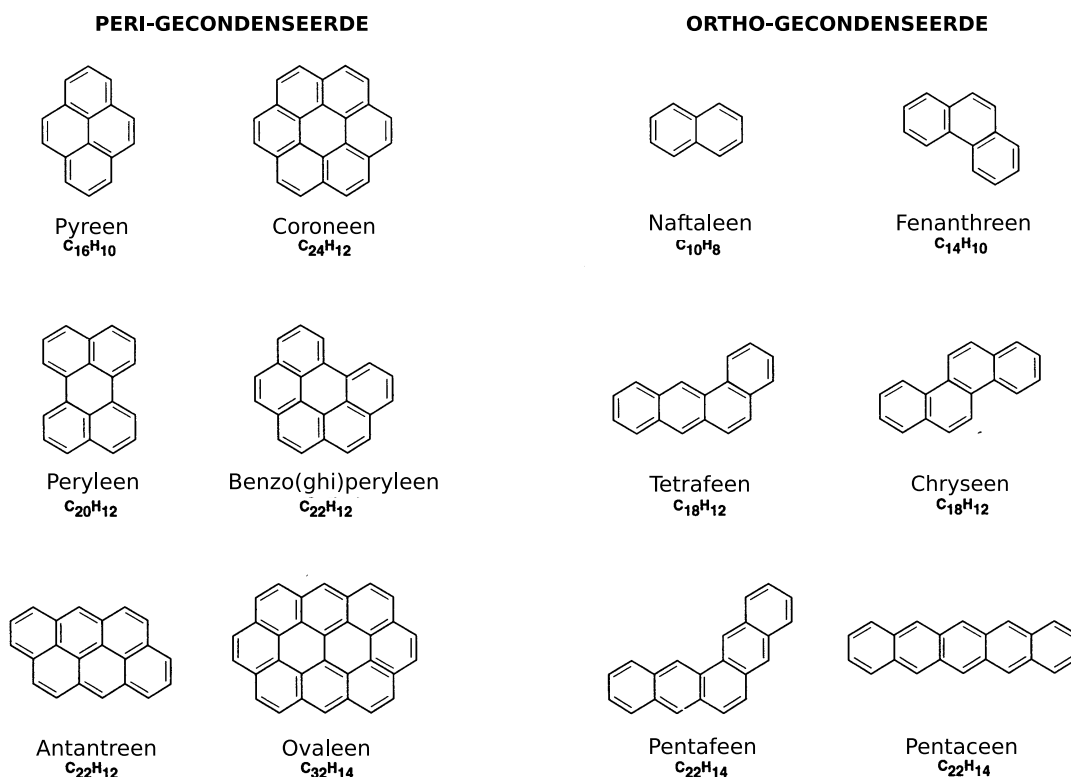
Definitie

PAHs behoren tot de familie van koolwaterstoffen, en worden gekenmerkt door de schikking van koolstofatomen in een ééndimensionale honingraatstructuur van samengevoegde zesvoudige aromatische ringen met H-atomen rondom.

PAHs zijn onderverdeeld in twee hoofdgroepen zoals Fig. 3 laat zien. Peri-gecondenseerde PAHs (links) hebben een compacte structuur waarin C-atomen deel uitmaken van drie of twee aparte ringen (in het laatste geval alleen aan de buitenkant). Binnen deze klasse vinden we de centraal gecondenseerde, quasi-circulaire PAHs zoals coroneen en circum-coroneen, waarbij de centrale ring omgeven is door een aantal ringen. Dit proefschrift spitst zich toe op deze compacte, centraal gecondenseerde PAHs die het meest stabiel zijn. Een typische compacte interstellair PAH met 50 koolstofatomen ($N_C = 50$) heeft een straal van $\sim 6.4 \text{ \AA}$, terwijl stofkorrels typisch opgebouwd zijn uit vele honderden of duizenden atomen, zoals afgeleid is uit extinctie-metingen. Typische PAH-groottes in het ISM zijn dus zeker kleiner dan die van 'klassieke' stofkorrels. Ortho-gecondenseerde PAHs (rechts) daarentegen worden gekenmerkt door open structuren waarin geen enkel C-atoom tot meer dan twee ringen behoort. De aromatische ringen zijn gerangschikt in rechte ketens (naftaleen, anthraceen, tetraceen) of gebogen rijen (fenanthreen, tetrafeen).

Formatie en evolutie

Men denkt dat interstellair PAHs ontstaan in de enveloppen van koolstofrijke AGB-sterren, als bijproduct van de processen die leiden tot de formatie van koolstofhoudende stofkorrels (roet). Vanwege hun structuur en hoge stabiliteit zijn PAHs inderdaad de bouwstenen van koolstof-roet. Omdat PAHs nauw verwant zijn aan stofkorrels zullen ze waarschijnlijk een soortgelijk evolutiepatroon volgen. Na te zijn vrijgekomen in het ISM zullen PAHs dramatische veranderingen ondergaan. Ze kunnen groeien en materie aantrekken, worden mogelijk zelf onderdeel van een stofkorrel en kunnen zwaardere hetero-atomen aan zich binden, zoals stikstof. In koude en dichte moleculaire wolken bevriezen PAHs in de ijsmantels die het op-



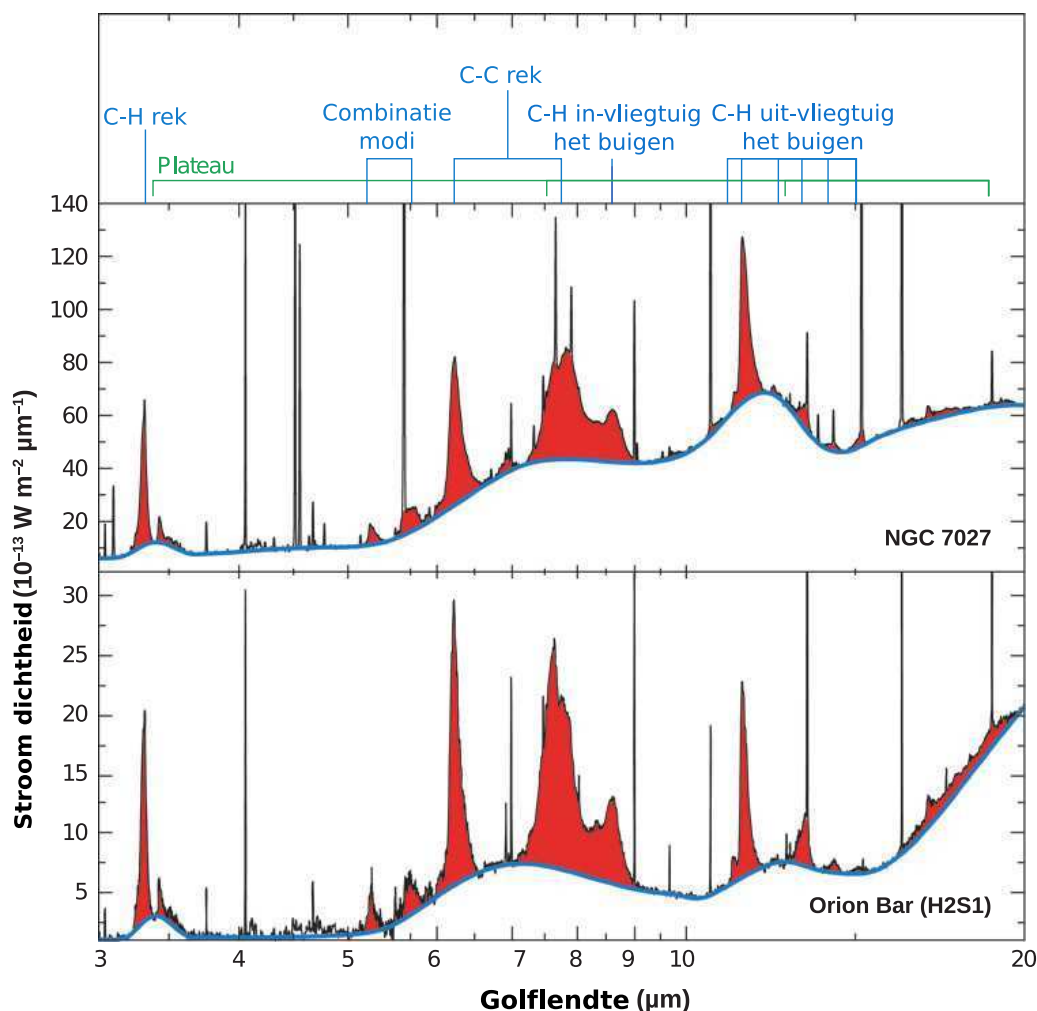
Figuur 3 — De moleculaire structuur van enkele representatieve PAHs. *Figuur aangepast van Salama et al. (1996).*

pervlak van stofkorrels omgeven. UV-straling en bombardering met kosmische stralen veroorzaken vele scheikundige processen aan het oppervlak waardoor complexere soorten kunnen ontstaan. Net als stofkorrels worden ook PAHs blootgesteld aan destructieve processen. Ze kunnen deels of geheel vernietigd worden door fotonen met hoge energie, kosmische stralen en sterke schokgolven in het diffuse ISM, hoewel alleen de kleine PAHs door fotodestructie aangetast lijken te kunnen worden.

Excitatie-mechanismen en IR-spectroscopie

We beschouwen nu een klein, neutraal PAH-molecuul in de singlet elektronische grondtoestand. De absorptie van UV-fotonen met energieën die overeenkomen met de discrete elektronische energieniveaus zal de PAH in een geëxciteerde staat brengen, gevolgd door een variëteit aan mogelijke de-excitatieprocessen. In een botsingsvrije omgeving zoals in de ruimte zal infrarode emissie het dominerende relaxatie-proces zijn. Het geëxciteerde molecuul zal naar een lagere elektronische staat terugvallen, waarbij het grootste deel van de oorspronkelijke excitatie-energie in de vorm van vibrationele energie vrijkomt. Vervolgens zal het sterk vibrationeel geëxciteerde molecuul afkoelen, voornamelijk door IR-emissie in specifieke banden.

Eerder was al genoemd dat het IR-spectrum van bijna elk object en gebied waar gas en stof aan UV-straling worden blootgesteld, gedomineerd wordt door relatief brede emissie-karakteristieken bij 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.3 en 12.7 μm (Fig. 4), plus verscheidene zwakkere karakteristieken. Tot bijna tien jaar geleden bleven de dragers een mysterie, zodat ze alge-



Figuur 4 — Het mid-infrarode spectrum van de het fotodissociatie-gebied in de Orion-bar en in de planetaire nevel NGC 7027. De spectra worden gedomineerd door een serie emissie-karakteristieken, die (bijna) allemaal toegeschreven kunnen worden aan de vibrationele toestanden van polycyclische aromatische koolwaterstoffen (boven). De smalle karakteristieken zijn atomaire of ionische lijnen die uit het HII-gebied of het foto-dissociatie-gebied afkomstig zijn. *Figuur overgenomen van Tielens (2008), een aangepaste versie van Peeters et al. (2002a).*

meen bekend werden als ongeïdentificeerde infrarode banden (Unidentified InfraRed, UIR). Later werd het mogelijk, door het vergelijken van astronomische spectra met laboratorium-spectroscopie en quantum-chemische berekeningen van de overgangen van bekende stoffen, de PAHs te identificeren als de veroorzakers van de UIR-banden. De waargenomen karakteristieken zijn kenmerkend voor de strekkende en buigende vibrationele toestanden van aromatische koolwaterstoffen.

Echter, hoewel de aromatische aard van de dragers van de UIR-band onbetwist vaststaat, is over de identificatie van de exacte soort lange tijd gedebatteerd. Koolstofhoudende vaste stoffen met een substantiële aromatische component – zoals kolen en amorphe roetdeeltjes – vertonen ook infrarode emissie die algemene gelijkenis vertoont met de waargenomen interstellair spectra, maar dit zijn ongeordende structuren en hun emissie-karakteristieken zijn vaak veel breder dan die van de observaties. Bovendien zijn voor emissie bij de waargeno-

men golflengtes veroorzakers nodig met een grootte van 50 – 100 C-atomen. Deze grootte-eis en de aromatische natuur van de veroorzaker samen vormen een sterke aanwijzing voor de keuze voor PAHs als veroorzaker, in de vorm van moleculen en/of kleine clusters, hoewel er nog geen specifieke moleculen geïdentificeerd zijn. Een moeilijkheid is dat de PAHs die in het laboratorium bestudeerd werden, veel kleiner zijn (< 50 C-atomen) dan de veronderstelde interstellaire PAH. Het lijkt waarschijnlijker dat het gaat om een familie van PAHs, in plaats van één enkel PAH-molecuul.

Het belang van interstellaire PAHs

De meest opvallende eigenschap van interstellaire PAHs is dat ze overal aanwezig zijn. De UIR-banden, waarvoor de PAHs de meest logische veroorzakers zijn, zijn aangetroffen in bijna elke astrofysische omgeving waar stof en gas door UV-fotonen bestraald worden, wat natuurlijk niet uitsluit dat ze ook aanwezig zijn op plaatsen waar ze niet de kans hebben geëxciteerd te worden. PAH-karakteristieken (alleen de 'waarneembare' in acht genomen), zijn geobserveerd in fotodissociatie-gebieden (PhotoDissociation Regions, PDRs), reflectienevels, jonge stellaire objecten, planetaire nevels, post-AGB objecten, galactische kernen, starburststelsels (hevig stervormende sterrenstelsels), Ultraluminous Infrared Galaxies (ULIRGs, stelsels met extreem hoge lichtkracht het infrarood), maar ook in infrarode cirrus bij hoge galactische latitudes op de oppervlaktes van donkere wolken, en in het algemeen in het interstellaire medium van sterrenstelsels.

Gezien deze wijdverspreidheid is het niet vreemd dat PAHs een cruciale rol wordt toegedacht in veel astrofysische processen. Vanwege de hoge stabiliteit van PAHs, de neiging van aromatische brandstoffen om te roeten, en de structurele gelijkenis tussen de koolstofbasis van PAHs en die van roet, worden PAHs geacht de bouwstenen te zijn van het koolstofcondensatieproces. Door middel van het foto-electrisch effect, infrarode emissie en afkoeling door gas-stofkorrelbotsingen domineren PAHs (en stofkorrels) de opwarming en afkoeling van het ISM, wat uiteindelijk de fysische condities en de fasestructuur van het ISM bepaalt en daardoor ook de evolutie van het ISM in sterrenstelsels. PAHs beïnvloeden de ladingsbalans, die de evenwichtstoestand van chemische reacties en gas-fase abundanties in moleculaire wolken weerspiegelt. Aan het oppervlak faciliteren ze een groot gebied voor chemische reacties aan het oppervlak, en zo spelen ze een significante rol in de interstellaire chemie. Er is voorgesteld dat PAHs de mogelijke veroorzakers zijn van de Diffuse Interstellaire Banden (DIB's), en mogelijk ook betrokken zijn bij de 2175 Å karakteristiek die de interstellaire UV-extinctiecurve domineert.

PAHs hebben vanwege hun eigenschappen ook een veelbelovende rol als tracer voor verscheidene astrofysische fenomenen. De wijdverspreidheid van hun emissiekarakteristieken en hun overwicht in het mid-IR spectrum van massieve stervormingsgebieden maken PAHs tot een potentieel krachtig werktuig voor de studie van stervorming door het hele heelal. In wezen gedragen de PAHs zich als een kleurstof voor de aanwezigheid van pompende FUV-fotonen en markeren ze daardoor de aanwezigheid van massieve sterren. De aanwezigheid van PAH-karakteristieken is ook gebruikt om onderscheid te maken tussen geschokt gas en PDRs. PAHs zijn, in combinatie met de emissielijnen, gebruikt in extragalactische studies om de fysische processen die ten grondslag liggen aan de lichtkracht van galactische kernen vast te leggen. Deze studies laten zien dat ULIRGs hun lichtkracht meer halen uit stervorming dan uit actieve galactische kernactiviteit (Active Galactic Nucleus- of AGN-activiteit). Hierdoor kunnen de sterktes van PAH-banden ook gebruikt worden om evolutionaire effecten te onderzoeken en om de evolutie van elementen in sterrenstelsels te volgen. PAH-karakteristieken zijn ook gede-

tecteerd in gebieden die ruimtelijk gecorreleerd zijn met de röntgenstraling (X-ray) van het hete gas in het stervormingsgebied M17 en in de gasuitstroom van het starburststelsel M82. Deze emissie vindt waarschijnlijk zijn oorsprong in gas dat is opgeslokt uit moleculaire wolken en getransporteerd door superwinden en galactische fonteinen. PAHs zouden dan gebruikt kunnen worden als markerings voor meegevoerd materiaal om deze transportatiemechanismen aan te duiden.

Waarom we het botsingen van PAHs in het ISM bestuderen

De fotofysica en fotochemie van PAHs in de ruimte zijn uitgebreid onderzocht. PAH-fotoexcitatie met daarop volgend IR-emissie en fotodestructie zijn zowel theoretisch als experimenteel goed bestudeerd, en de observationele weerslag daarvan is bevestigd. Laboratoriumstudies van moleculen in omstandigheden zoals verwacht in het interstellair medium, hebben de kennis van de aard van de interstellaire stoffen en de betrokken processen verbeterd. De satellieten ISO en Spitzer hebben de alomtegenwoordigheid van de UIR-banden bevestigd, en de enorme rijkdom van het UIR-spectrum en de wijdverspreide variaties in de relatieve sterktes en profielen van deze karakteristieken aangetoond, van object tot object en binnen objecten.

Ook de bewerking van stofkorrels door processen in het ISM is uitgebreid bestudeerd, niet alleen op gebied van interactie met fotonen (zoals verstrooiing, extinctie of foto-electrische verhitte), maar ook de invloed van botsingen, voornamelijk door supernova-schokgolven. Berekeningen voorspellen de complete vernietiging van grote stofkorrels in snelle schokgolven die zich door de warme fase van het interstellair medium (WIM) bewegen. schokgolven met snelheden groter dan 50 km s^{-1} zijn ook in staat de grootste korrels ($1000 \text{ \AA} \leq a \leq 2500 \text{ \AA}$) te verbrijzelen in fragmenten met een straal kleiner dan $\approx 500 \text{ \AA}$. Tussen de fragmenten zouden ook PAHs kunnen zitten, waarvan verwacht wordt dat deze vervolgens ook door de schok bewerkt zullen worden. Helaas wordt in deze modellen geen rekening gehouden met de vernietiging van PAHs door het wegkaatsen van atomen in het gas achter de schokgolf, wat wel degelijk relevant zou kunnen zijn voor de evolutie van de interstellaire PAH-populatie.

Als men dit alles bekijkt, valt op dat een belangrijke schakel in de keten mist: de behandeling van de invloed van botsingen op PAHs in het ISM. PAHs en stofkorrels zijn nauw verbonden en men kan redelijkerwijs aannemen dat ze dezelfde soort botsingsprocessen doormaken gedurende hun levenscyclus. Waar voor stofkorrels de fysica van deze processen onderzocht is en de astrofysische implicaties in kaart zijn gebracht, is dit niet het geval voor PAHs. Theoretische modellen die botsingsprocessen meenemen (met name de processen die leiden tot beschadiging en vernietiging van PAHs) zijn er niet, en dit gebrek aan informatie maakt de interpretatie van PAH-observaties moeilijk in gebieden waar deze processen plaatsvinden. Vanuit observationeel oogpunt is er momenteel weinig bewijs voor het bestaan van PAHs in gebieden die supernova-schokgolven ondergaan. Dit laat zien hoe moeilijk het is om de emissie van supernovaresten te onderscheiden van de achtergrond van materie van het sterrenstelsel. Aan de andere kant heeft een studie van de supernovarest (SuperNova Remnant, SNR) N132D in de Grote Magellaanse Wolk de aanwezigheid aangetoond van karakteristieken die worden toegeschreven aan PAH-soorten met relatief veel koolstof ($N_C \sim 4000 \text{ C-atomen}$). PAH-emissie is gedetecteerd in verband met het door schokgolven verhitte, röntgen-stralende gas in het stervormingsgebied M17, en de superwind die aangedreven wordt door de nucleaire starburst in M82.

Het doel van ons onderzoek is deze lacune in ons begrip van de fysica achter botsingsprocessen van PAHs op te vullen, en duidelijk te maken hoe dit de PAH-evolutie in astrofysische context beïnvloedt. Deze kennis zou kunnen helpen de effectieve rol van PAHs in de kosmische

levenscyclus beter te begrijpen, met name hun relatie met stofkorrels. Deze resultaten zouden ook nieuwe inzichten kunnen geven om de detectie – of non-detectie van PAHs in specifieke gebieden te interpreteren en zouden uiteindelijk meer argumenten kunnen leveren voor PAHs als moleculaire kleurstof, bijvoorbeeld om gebieden met compacter ingevangen materiaal te volgen.

Sleutelvragen

Het onderzoek dat in dit proefschrift wordt beschreven, heeft als doel vast te stellen *hoe* de verschillende omstandigheden in het ISM de PAHs beïnvloeden, waarbij de nadruk gelegd wordt op de *botsingsprocessen* door electronen en ionen met hoge snelheden. Deze hoge snelheden ontstaan door de thermische en relatieve (inerte) beweging, die wordt veroorzaakt door de energie die door zeer snelle schokgolven (thermische beweging) in het gas geïnjecteerd wordt en door kosmische straling. Hoewel PAHs een hoofdbestanddeel van het ISM zijn en deze processen een cruciale rol spelen in de ontwikkeling van de PAHs, ontbrak het tot nog toe aan een gedetailleerde studie naar de fysica achter de interactie tussen PAHs en hoog-energetische deeltjes (ionen en electronen). De eerste sleutelvraag die we in dit proefschrift behandelen is:

Wat gebeurt er met PAH-moleculen wanneer ze gebombardeerd worden door hoog-energetische ionen en electronen? Zijn ze in staat om (ongeschonden) te overleven, of worden ze zwaar beschadigd of zelfs volledig vernietigd?

Hieruit volgt de volgende belangrijke vraag:

Wat zijn de astrofysische implicaties van de processen die PAHs beïnvloeden?
i.e.

Wat is het verband tussen microscopische processen (ion/electron - PAH interactie) en de macroscopische effecten op de interstellaire PAH-populatie?

Resultaten van dit proefschrift

In **Hoofdstuk 2** presenteren we een studie van de complexe omgeving van de SNR N157B, in de Grote Magellaanse Wolk. We gebruiken hiervoor waarnemingen over meerdere golflengtes. Het hoofdstuk bevat een analyse van een SNR en de verschillende habitatten van PAHs. In deze SNR bevinden zich uiteenlopende omgevingen zij aan zij, zoals een moleculaire wolk, stroken van stof, hete bellen van geschokt gas, een OB-associatie en een HII-gebied, waardoor het gebied een zeer goed laboratorium is voor de studie naar PAHs en de omstandigheden waaraan zij blootgesteld worden. Uit IRAC- en MIPS-afbeeldingen genomen door Spitzer, concluderen we dat er geen bewijs is voor een infrarode tegenhanger van de SNR. De infrarode straling die we waarnemen wordt gedomineerd door een wolk van stof/PAH en moleculair gas, die aan de SNR grenst. De wolk bevat de compacte 2MASS-bron J05375027-6911071. Dit object heeft een diameter van ongeveer 3 parsec, een electronen-dichtheid van $100\text{--}250\text{ cm}^{-3}$, en is gefoto-ioniseerd door een O8-O9 ster. Van de achterkant gezien is het waarschijnlijk een zogenaamde “open HII blaarstructuur”¹. Ondanks het feit dat de SNR röntgenstraling en de

¹Een dergelijke structuur ontstaat wanneer een massieve ster gevormd wordt aan de rand van een HII-gebied. Wanneer de ioniserende straling van de ster de rand van de HII-wolk bereikt, stroomt het geïoniseerde HII materiaal tussen de wolken door. Dit veroorzaakt, afhankelijk van de gezichtshoek een typische configuratie, ofwel blaarstructuur.

infrarode wolk elkaar (in projectie) overlappen, vinden we slechts zwakke emissie die duidt op schokgolven ([FeII]). Zowel het exciteren als het verwarmen van de uitgebreide wolk, worden gedomineerd door foto-ionisatie door de jonge hete O-sterren van LH 99. Het gebrek aan duidelijk bewijs voor schokgolven geeft aan dat de moleculaire stofwolk op het moment niet significant wordt beïnvloed door de SNR. Dit doet vermoeden dat de voorloper van de SN een ster was van gemiddelde massa $M \approx 25 M_{\odot}$.

In **Hoofdstuk 3** en **Hoofdstuk 4** presenteren we de door ons ontwikkelde modellen, die ons voor het eerst in staat stellen de effecten van botsingen tussen PAHs en ionen (H, He en C) en tussen PAHs en electronen (met een energie tussen de 10 eV en 10 keV) kwantitatief te beschrijven. Er is behoefte aan specifieke modellen, aangezien PAHs moleculen zijn, wat betekent dat de klassieke benadering met behulp van de vaste stof fysica niet kan worden toegepast. In een vaste stof draagt het invallende energetische deeltje energie over aan het atoom. Als de overgedragen energie hoger is dan de bindingsenergie op het inslagpunt, dan wordt er een primair atoom weggeslagen. Dit atoom zal botsen met andere atomen, waarbij de energie wordt verdeeld via een reeks botsingen. In een PAH zal een enkel C-atoom met name op deze manier geraakt worden. Wanneer de overgedragen energie dan een bepaalde grenswaarde overschrijdt, vindt er geen botsingsreeks plaats, maar zal het atoom uit het molecuul worden geschoten. In een molecuul spelen zich dus uitsluitend enkele transacties af, die kunnen worden beschreven met behulp van een aangepaste versie van de tweevoudige botsingsmodellen die voor vaste stoffen worden gebruikt. Het energieverlies ten opzichte van de atomaire electronen zal niet worden verdeeld rondom het gebied van de botsing, zoals in een vaste stof, maar zal verspreid worden over de beperkte straal van de PAH. Het resultaat in termen van de vernietiging van PAHs kan niet worden geëxtrapoleerd uit het gedrag van stofdeeltjes en hangt sterk af van het soort projectiel en de hoeveelheid energie die er mee gepaard gaat.

We hebben een model ontwikkeld voor de interactie tussen energetische ionen en electronen en PAHs, waarbij we rekening houden met de moleculaire aspecten van deze interactie. Een schematische weergave van de analyse van PAH-vernietiging is te zien in Tabel 1. De interactie tussen PAHs en ionen wordt beschreven in termen van nucleair (elastisch) en electronisch (inelastisch) energieverlies, wat kan leiden tot het verlies van koolstofatomen en daaropvolgend ontwricting en vernietiging van de moleculen. Het energieverlies in de kern ontstaat door botsingen tussen het projectiel en een enkel atoom in het doelwit. Als de energie die wordt overgedragen hoger is dan een bepaalde grenswaarde T_0 , dan wordt het koolstofatoom weggeschoten. Dit is de situatie waarin wij zijn geïnteresseerd, aangezien het nog niet in eerdere studies behandeld is. We hanteren een grenswaarde $T_0=7.5$ eV, wat een redelijke waarde is, maar het is ook nodig om deze waarde experimenteel te bepalen. Het energieverlies ten opzichte van de atomaire electronen (electron-interactie) wordt beschreven in termen van de remkracht van een electronengas met een geschikte electronendichtheid (jellium benadering”), waarbij een geometrie toegepast wordt die past bij de vorm en eindige afmetingen van de PAH. Voor botsingen met electronen met een energie tussen de 10 eV en 10k eV, hebben we een analytische uitdrukking afgeleid voor de gemeten remkracht in grafiet en deze hebben we toegepast op de PAHs. De kans dat een door electron-interacties en -botsingen aangeslagen PAH uiteenvalt, is afgeleid met behulp van ontledingsreacties, waarbij een enkel reactant (de PAH) ontleed wordt in verschillende reactieproducten. De waarde van de parameter E_0 , die deze kans bepaalt, kan nogal variëren. Wij kiezen een waarde van 4.6 eV, wat overeenkomt met een extrapolatie van interstellaire condities, maar een betere bepaling is vereist.

In **Hoofdstuk 3** gebruiken we onze modellen om de levensduur te bepalen van PAHs die onderhevig zijn aan botsingen met ionen en electronen. Deze hebben hoge snelheden, die ont-

Tabel 1 — Overzichtstabel voor PAH botsingen met ionen en electronen.

Omgeving	Energie verdeling	Energie bereik (eV)	Projectielen			Electronen	
			Ionen		Elast. (Elec.) interactie	Elast. (Nucl.) interactie	Inelast. (Elec.) interactie
Interst. Schokgolven ^a Hoofdstuk 3	Inert	$10 - 10^4$	✓	§ 3.2 § 3.3.1	✓	§ 3.3.2	✓ ^c § 3.3.3
	Thermisch	$5 - 50$	✓	§ 3.2 § 3.3.1	✓	§ 3.3.2	
Heet Gas ^b Hoofdstuk 4	Thermisch	$10 - 10^4$	✓	§ 4.2.2	✓	§ 4.2.1	✓ ^c § 4.3
	CR energie verdeling	$5 \text{ MeV} - 10 \text{ GeV}$	✓ ^c	§ 5.2	✓	§ 5.3	
Kosmische straling Hoofdstuk 5							

(a): Schoksnelheid, $v_s = 50 - 200 \text{ km s}^{-1}$.

(b): Gas temperatuur, $T = 10^5 - 10^8 \text{ K}$.

(c): Voor elke omgevingssoort geeft het dubbele teken (✓✓) de belangrijkste oorzaak voor PAH vernietiging weer (met $N_C = 50$).

staan zijn door de thermische en relatieve bewegingen van interstellaire schokgolven, die met een matige snelheid door het gas bewegen (v_s tussen de 50 en 200 km s⁻¹ – zie Tabel 1). We vinden dat interstellaire PAHs ($N_C \sim 50$) niet overleven in schokgolven met snelheden groter dan 100 km s⁻¹ en dat grotere PAHs. ($N_C \sim 200$) worden vernietigd wanneer deze snelheid ≥ 125 km s⁻¹ is. Voor schokgolven met een snelheid tussen de $\approx 75 - 100$ km s⁻¹ heeft de PAH een kans te overleven, hetzij in een nieuwe vorm aangezien het waarschijnlijk is dat de PAH een behoorlijke fractie (20 – 40%) van zijn koolstofatomen zal verliezen. De levensduur van een PAH tot aan vernietiging is $t_{\text{SNR}} \sim 1.6 \times 10^8$ yr en $\sim 1.4 \times 10^8$ yr voor N_C is respectievelijk 50 en 200. Kleine PAHs worden voornamelijk vernietigd door electronen, grote door ionen. Deze resultaten zijn robuust en onafhankelijk van de onzekerheden in de parameters T_0 en E_0 , die beiden nog niet nauwkeurig genoeg bepaald zijn in experimenten. De berekende levensduur is kleiner dan de waarden die zijn gevonden voor koolstofhoudende korrels (6×10^8 yr), maar ligt dichtbij de levensduur van gehydrateerde, amorfe koolstof (2×10^8) en ver van de tijdschaal waarop sterrestof wordt geïnjecteerd (2.5×10^9 yr). De waargenomen aanwezigheid van PAHs in geschokte gebieden vereist daarom een efficiënt hervormingsmechanisme en/of een beschermende omgeving.

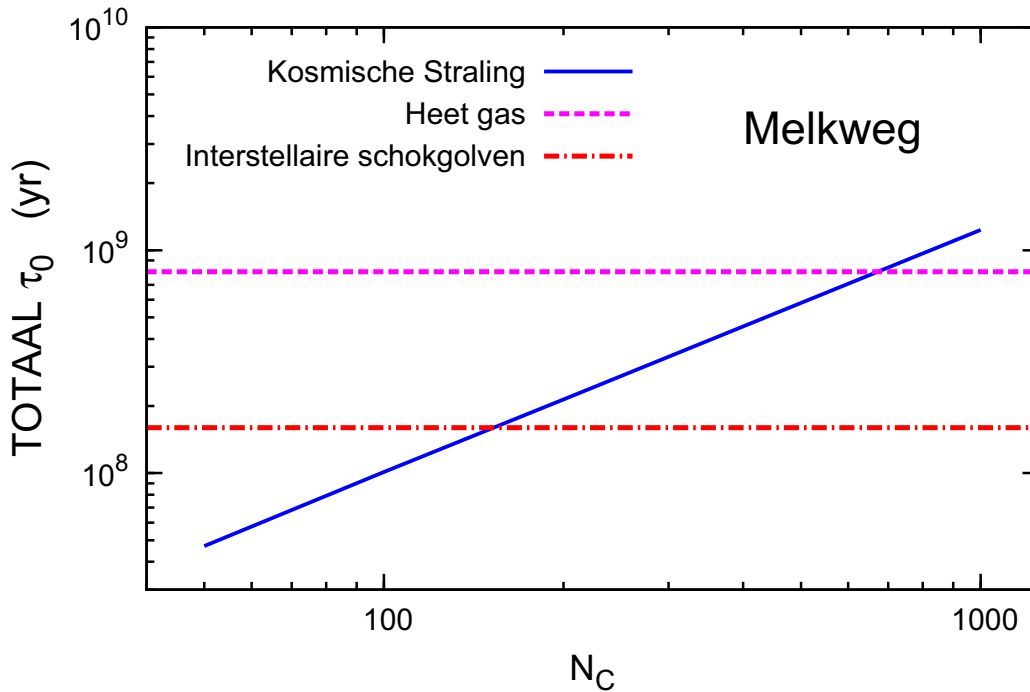
In **Hoofdstuk 4** brengen we onze modellen in stelling om te bepalen hoe lang een PAH overleeft in een heet gas dat röntgenstraling uitzendt (temperatuur tussen de 10^3 en 10^8 K, zie Tabel 1). In dit geval worden de snelheden van de ionen en electronen veroorzaakt door de energie die in het gas wordt geïnjecteerd door zeer snelle schokgolven (thermische beweging). We vinden dat het PAH vernietigingsproces gedomineerd wordt door electronbotsingen wanneer de temperatuur boven de $\sim 3 \times 10^4$ K komt, en door nucleaire interactie met helium bij lagere temperaturen. Kleine PAHs worden makkelijker vernietigd dan grote als de temperatuur lager is dan $\sim 10^6$ K, maar dit verschil wordt kleiner in een heter gas. Voor een PAH van 1000 C-atomen zijn nucleaire interacties de belangrijkste oorzaak van vernietiging. In een heet en ijl gas (bv. de gasuitstroom van M82) worden PAHs met afmetingen tussen de 50 en 200 C-atomen binnen een paar duizend jaar vernietigd door middel van electronbotsingen. In koudere en meer compacte gebieden (bv. Orion) kunnen PAHs wel enkele 10^7 jaar overleven voordat ze worden vernietigd door nucleaire interactie-processen. De absorptie van röntgenfotonen, speelt in verhouding tot electronbotsingen een kleine rol bij de vernietiging van PAHs in het hete gas dat verbonden is met sterrewinden en supernova-explosies. De PAHs die in de buurt van zulke gebieden waargenomen worden, moeten geïsoleerd zijn van dit hete gas en bevinden zich waarschijnlijk in een kouder PDR-achtig gas dat meegevoerd wordt door sterrewinden en galactische winden. Zo beschouwd vormen PAHs dus een goede aanwijzing voor de aanwezigheid van meegevoerd compacter materiaal. De erosie van PAHs gebeurt via C₂-verlies aan het oppervlak van het molecuul, waarbij de aromatische structuur dus behouden blijft. De levensduur van een PAH in een ijl, heet gas ($n_H \approx 0.01$ cm⁻³, $T \approx 10^7$ K, kenmerkend voor het gas in de gasuitstromen van een sterrenstelsel), is ongeveer duizend jaar, een orde van grootte korter dan de gemiddelde levensduur van dit soort objecten en ook veel korter dan de levensduur van een stofdeeltje van ongeveer dezelfde grootte ($a \approx 5$ Å). Dit kan betekenen dat de vernietigende kracht van ion- en electronbotsingen met zeer kleine korrels tot nu toe onderschat is.

In **Hoofdstuk 5** beschouwen we projectielen met veel meer energie, zoals bijvoorbeeld ionen van kosmische straling (H, He, CNO, Fe-Co-Ni) en electronen met energieën tussen de 5 MeV en 10 GeV (zie Tabel 1). Het energieverlies van een dergelijk hoog-energetisch deeltje vereist een speciale behandeling die gebaseerd is op een formalisme dat afwijkt gevallen met lagere energie die zojuist behandeld zijn. Wat de ionen betreft, is het afstoppen door de kern volkomen verwaarloosbaar en wordt het energieverlies gedomineerd door electronische inter-

actie, die goed beschreven wordt door de Bethe-Bloch-vergelijking (in plaats van de Lindhard & Scharff vergelijking). De interactie van PAHs met hoogenergetische electronen kan worden gezien als botsingen tussen het inkomende electron en de enkele kern in de PAH. Dit is niet het geval voor lagere energieën. We bepalen de vernietigende kracht van invallende kosmische straling op PAHs en de tijd die de PAHs dit alomtegenwoordige bombardement kunnen overleven onder verschillende omstandigheden (in schijven van sterrenstelsels, halos, de gasuitstroom van starbursts en de koelende gasstromen in clusters van sterrenstelsels). De spectra van kosmische straling die we gebruiken voor de zon en omstreken zijn afkomstig van metingen die dichtbij de aarde zijn genomen, maar gecorrigeerd zijn voor de invloed van de Heliosfeer (ofwel zonsmodulatie). Om er achter te komen hoe de kosmische straling varieert over de schijf van de melkweg en de halo, gebruiken we specifieke modellen, die gebaseerd zijn op metingen van γ -straling. Voor overige sterrenstelsels schalen we de dichtheid van kosmische straling met de stervormingssnelheid van het sterrenstel, voor een bepaling van de kosmische straling in clusters gebruiken we γ -straling waarnemingen.

We vinden dat de tijd die het kost om PAHs door de ionen in kosmische straling te vernietigen afhangt van de electron excitatie-energie E_0 , de minimale energie van de kosmische straling $E_{\min}$ en de hoeveelheid energie die beschikbaar is voor dissociatie. Kleine PAHs worden sneller vernietigd, met name door He en CNO. De kortste levensduur die we vinden is $\sim 10^8$ yr, wat vergelijkbaar is met de levensduur in interstellair schokgolven. Kosmische straling is beter in staat om de PAH in verstrooide wolken aan te tasten, waar de invloed van interstellair schokgolven minder groot is. Voor electronbotsingen is de levensduur onafhankelijk van de grootte van de PAH, maar varieert hij met $E_{\min}$ en de grenswaarde voor de energie T_0 . De minimale levensduur is in dit geval 1.2×10^{13} yr. Een dergelijk lange levensverwachting sluit kosmische straling uit als belangrijke PAH-vernietiger. In de halo van normale sterrenstelsels zoals NGC 891 en in de gasstromen van starbursts zoals M82 is de levensverwachting van PAHs, ten opzichte van vernietiging door kosmische straling, $\gtrsim 100$ Myr, wat vergelijkbaar is met (of zelfs iets langer is dan) de circulatie tijdschaal tussen de schijf en halo en duur van de starburst (respectievelijk ~ 200 Myr en ~ 20 Myr). In de clusters met koelende stromen, zoals A85 en Virgo, is de intensiteit van kosmische straling vergeleken met de zonsomgeving opmerkelijk sterker. Hierdoor is de PAH levensverwachting veel korter. Desalniettemin is die verwachting met betrekking tot de vernietiging door kosmische straling tenminste 100 keer zo hoog dan de verwachting in een heet gas ($1 - 10^3$ yr). Dit betekent dat de moleculen zeer snel worden vernietigd in de gasfase van het inter-cluster medium. Tenslotte worden de PAHs die verspreid zijn in het hete gas dat te vinden is in de halos van sterrenstelsels, de uitstromen van hevig stervormende sterrenstelsels en het inter-cluster media, snel vernietigd door botsingen met thermische ionen en electronen. Dit mechanisme is echter inefficiënt wanneer de moleculen geïsoleerd zijn van het gas, in kleine, meer compacte wolken. Kosmische straling is wel in staat die compacte wolken te bereiken en zal de levensduur bepalen van deze beschermde PAHs. Dit kan gebruikt worden als aanwijzing voor de aanwezigheid van koud, meegevoerd materiaal.

Om dit werk samen te vatten, hebben we de levensduur van PAHs bepaald in het interstellair medium van de Melkweg. We hebben een model gebruikt voor het ISM, dat uit 2 fasen bestaat. In dit model verplaatst de materie zich snel van de warme gebieden tussen de wolken naar de koude wolken. PAHs (alsmede stof), worden vernietigd door SN schokgolven wanneer ze zich tussen de wolken bevinden. De tijd die het kost om SN schokgolven te ontwikkelen is afgeleid volgens McKee (1989) (zie Hoofdstuk 3). Fig. 5 laat de tijd zien die kosmische straling en supernova schokgolven nodig hebben om PAHs te vernietigen. Deze waarden zijn bepaald onder aanname van $T_0=7.5$ eV en $E_0=4.6$ eV. De kromme met de naam “cosmic rays” (kosmi-



Figuur 5 — De levensverwachting van PAHs in de Melkweg ten opzichte van kosmische straling, interstellaire schokgolven ($50 \leq v_s \leq 200 \text{ km s}^{-1}$) en heet gas dat door adiabatische schokgolven is verhit ($v_s > 200 \text{ km s}^{-1}$).

sche straling) refereert aan kosmische straling ion- en electroninteractie in de Melkweg. De lijn waarbij “interstellar shocks” (interstellaire schokgolven) staat, refereert aan schokgolven met lage snelheden ($< 200 \text{ km s}^{-1}$), deze schokgolven koelen door middel van straling af, terwijl de lijn genaamd “hot gas” (heet gas) refereert aan schokgolven met hoge snelheden ($> 200 \text{ km s}^{-1}$), waarbij de SNRs afkoelen door middel van adiabatische expansie.

Antwoorden op de sleutelvragen

We zijn nu in staat om de sleutelvragen die we opgesteld hebben in §6.1 te beantwoorden. Wat de eerste vraag betreft, kunnen we stellen dat het lot van PAHs die worden gebombardeerd met hoog energetische ionen en electronen sterk afhangt van zowel het energiebereik en de energieverdeling van de projectielen, als de grootte van het PAH-molecuul. PAHs met minstens 50 koolstofatomen kunnen schokgolven overleven met snelheden tot 100 km s^{-1} , hoewel hun structuur waarschijnlijk verandert door het verlies van koolstofatomen. Bij snelheden groter dan 100 km s^{-1} worden de PAHs volledig vernietigd (**Hoofdstuk 3**). Hetzelfde geschiedt in een gas van een miljoen graden (**Hoofdstuk 4**). Zowel in schokgolven als in een heet gas zijn electronen de voornaamste oorzaken van de vernietiging. Wanneer de vernietiging wordt toegebracht door de hoogenergetische deeltjes van kosmische straling (5 MeV – 10 GeV), dan wordt deze veroorzaakt door inelastische botsingen met ionen (**Hoofdstuk 5**). In alle gevallen zijn grote PAHs weerbaarder dan kleine PAHs.

Betreffende de tweede vraag, hebben we allereerst aangetoond dat, zelfs op kleine schaal, PAHs onderhevig zijn aan een keur van omstandigheden die in staat zijn hun karakteristieke eigenschappen te veranderen (**Hoofdstuk 2**). De invloed van schokgolven is met name merkbaar

in het warme deel van de interstellaire materie, tussen de wolken en is minder efficiënt in diffuse wolken. Kosmische straling daarentegen, kan de PAHs overal bereiken (behalve misschien in de meest compacte kernen van moleculaire wolken) en kan elk materiaal aantasten. PAHs die verspreid zijn in een heet gas zoals in de halos van sterrenstelsels, de uitstromen van starbursts en het ICM worden snel vernietigd door botsingen met electronen. Dit mechanisme is inefficiënt als de moleculen zich in compactere, geïsoleerde wolken bevinden. Kosmische straling kan ook deze geïsoleerde wolken bereiken en bepaalt de levensduur van deze beschermde PAHs. Dit kan gebruikt worden om de aanwezigheid van koud, meestromend materiaal aan te duiden. Deze conclusie kan worden getrokken uit de gecombineerde resultaten van **Hoofdstuk 3**, **Hoofdstuk 4**, en **Hoofdstuk 5** en onderstreept het verband tussen microscopische en macroscopische effecten op de interstellaire PAH-populatie.

