



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Shining Light on PAHs in Space

Andrews Mancilla, H.E.

Citation

Andrews Mancilla, H. E. (2017, June 7). *Shining Light on PAHs in Space*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/50196>

Version: Not Applicable (or Unknown)

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

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/50196>

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

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/50189> holds various files of this Leiden University dissertation

Author: Andrews Mancilla, H.

Title: Shining Light on PAHs in Space

Issue Date: 2017-06-07

Nederlandse Samenvatting

Sterren worden gevormd in koude wolken van stof en gas door gravitatie-instorting en uiteindelijk de ontsteking van het materiaal initiëren, waarbij waterstofatomen tot helium fuseert. Naarmate sterren evolueren, blijven ze lichtere elementen fuseren tot zwaardere elementen, waardoor ongelooflijke hoeveelheden energie in de ruimte worden vrijgegeven. Afhankelijk van hun massa, zullen sterren op een zeker punt in hun leven stoppen met kernfusie van elementen. Sterren, zoals de zon, kunnen koolstof synthetiseren, maar het grootste deel van het totale koolstofbudget in het interstellair medium is afkomstig van sterren die massiever zijn dan de zon. Koele heldere sterren die verder geëvolueerd zijn, zoals de zogenaamde Asymptotische Reuzentak sterren (AGB) sterren, kunnen tijdens hun leven zelfs veel zwaardere elementen vormen. Op deze manier kunnen sterren, terwijl ze evolueren, massa in de ruimte brengen, alsook de chemie en de fysica van hun omgeving beïnvloeden door hun sterke straling. Als sterren hun brandstofvoorraad hebben uitgeput, waarbij ze ofwel kunnen exploderen als een supernova of een minder tragische dood sterven, zullen de overblijfselen van de ster het interstellair medium verrijken en zodoende de ingrediënten leveren voor de geboorte van toekomstige generaties sterren. Dit is de levenscyclus van materie in het interstellair medium en het vormt de machinerie waarmee de 'gewone' baryonische materie steeds opnieuw wordt gerecycled.

Deze interactie tussen straling en materie (die in de sterren zelf worden gevormd of de resten van de vorige generaties sterren zijn) bepaalt het type van complexere verbindingen die we in het interstellair medium vinden. Tegenwoordig weten we dat het interstellair medium veel meer complex materiaal bevat, waaronder koolstofhoudende moleculen, zoals benzeen, methanol, zelfs aminozuren en polycyclische aromatische koolwaterstoffen. Dit proefschrift is met name gericht op het laatste element uit deze opsomming, namelijk: de polycyclische aromatische koolwaterstoffen, kortweg aangeduid als PAH's.

PAH's zijn naar verwachting de meest voorkomende organische moleculen in de ruimte. Hun relevantie in interstellair wolken is significant (zie hoofdstuk 1) en ze worden zelfs verwacht een rol te spelen in de vorming van het leven, zoals we het op de Aarde kennen. Hoe deze koolstofhoudende verbindingen in/rondom sterren zijn samengesteld, wordt nog niet goed begrepen en is uiterst uitdagend. We kunnen echter bestuderen hoe deze familie van moleculen onder astrofysische omstandigheden evolueert om aanwijzingen te krijgen over hun rol in de ruimte.

De emissie van PAH's wordt waargenomen in het mid-infrarode spectrum van een uiteenlopend type astronomische bronnen, die onderworpen zijn aan hoog energetische (ultraviolette) stellair straling. Daarom is hun emissie gemakkelijk te zien in wat we fotodissociatie-gebieden (PDR's) noemen. Dit zijn de regio's rond de sterren waar de foto-

chemie wordt bepaald door ultraviolette straling, en die zodoende corresponderen met de overgangslagen waar het materiaal verandert van, daar het meestal atomair en geïoniseerd is (dichter bij de ster), naar voornamelijk moleculair (verder weg van de ster, in de meer afgeschermd gebied). In dit proefschrift richten we ons op de studie van de emissie van PAH's in de PDR's rond sterren, om te begrijpen hoe deze familie van moleculen evolueert met variaties in de fysische condities.

Wij verwijzen naar PAH's als een familie van moleculen, en niet als individuele moleculen. Na het absorberen van fotonen met een hoge energie raken de PAH's in een aangeslagen toestand, gaan door verschillende interne processen en kunnen ze uiteindelijk terug vallen in een lagere energietoestand door hun trillingen modi, die detecteerbaar zijn in het mid-infrarode deel van het spectrum van astronomische bronnen. Aangezien dergelijke vibraties gemeenschappelijk zijn bij PAH's als een familie, kan de identificatie niet één op één worden uitgevoerd. Op een bepaalde manier kunnen we dit zien als mensen op Aarde. We hebben allemaal dezelfde fysieke structuur en we lopen, rennen en springen op een soortgelijke manier. We hebben echter individuele vingerafdrukken, die elk van ons uniek maken. In tegenstelling tot onszelf hebben we nog geen vingerafdrukken van individuele PAH's kunnen detecteren en daarom kunnen we ze niet afzonderlijk onderscheiden. We kunnen ze alleen als een geheel bestuderen, zoals aliens ons zouden bestuderen als mensen, en niet als onafhankelijke individuen.

PAH's worden vervolgens op statistische wijze bestudeerd. Vanwege de veeleisende experimentele opstellingen en tijdrovende berekeningen die nodig zijn om de moleculaire eigenschappen van individuele PAH's te bestuderen, is het meeste onderzoek vanuit een vrij algemeen standpunt uitgevoerd, waarbij algemene eigenschappen worden toegewezen aan een klasse van moleculen die overeenkomen met de waarnemingen. Tegengoedig kunnen we dankzij de succesvolle ontwikkeling van experimenten en berekeningen (zie hoofdstuk 1) nog een stap verder gaan en PAH's bestuderen vanuit een moleculaire basis. Dat wil zeggen, we kunnen de fysieke eigenschappen van specifieke PAH's met verschillende kenmerken verkrijgen, hun gedrag onder astrofysische omstandigheden modifieren en op deze manier zulke specifieke moleculen als toepasselijke vertegenwoordigers van PAH's van verschillende klassen gebruiken. Dit is precies het idee achter de projecten die in dit proefschrift worden gepresenteerd. Hierbij is de uitgebreide actuele kennis die beschikbaar is over specifieke PAH's (geen gebruik makend van algemene eigenschappen) in astrofysische contexten geplaatst om enkele sleutelvragen in het onderzoeksgebied van PAH's aan te pakken.

Dit proefschrift

In hoofdstuk 2 gebruiken we de beschikbare gegevens over honderden individuele PAH's die zijn samengesteld in de NASA Ames PAH IR Spectroscopische Database om het bestaan van de zogenaamde grandPAH's op de helderste mid-infrarood spots in PDR's te onderzoeken. De grandPAH's zijn voorgesteld om een set van de stabielste PAH-moleculen te vertegenwoordigen, die de intense processen in het interstellair medium kunnen overleven en domineren derhalve de PAH-populatie in de ruimte. De vraag of een unieke mix van PAH's in de helderste plaatsen van PDR's uitstraalt, vloeit voort uit de observaties zelf: de mid-infrarood-emissie op de helderste plek in de PDR's rond drie verschillende hete sterren is verrassend vergelijkbaar. We hebben de emissie van de PAH's in de database gemodelleerd en we hebben de waarnemingen gemonteerd om de emitterende PAH-populatie te

karacteriseren. We hebben vernomen dat subtiele variaties in de emissie-eigenschappen van individuele PAH's kunnen leiden tot waarneembare verschillen in de resulterende spectra. We hebben dus bewijs gevonden dat de PAH-populaties vanuit verschillende gezichtslijnen opvallend vergelijkbaar moeten zijn en zodoende het concept van grandPAH's mogelijk zou kunnen worden toegepast. Deze unieke mix van PAH's zou het resultaat zijn van intensieve verwerking bij de grenslijm tussen de PDR en de moleculaire wolk. In het hypothetische scenario waar de grandPAH's geïdentificeerd kunnen worden, zouden ze een beginpunt zijn voor het opsporen van de wijze waarop het koolstofhoudende materiaal rond sterren op een hoopt en wordt vernietigd.

In hoofdstuk 3 gebruiken we een nog specifiekere aanpak, waar we drie goed (theoretisch en experimenteel) gebestudeerde individuele PAH's overwegen om te zien hoe ze uiteindelijk met verschillende fysische condities in een prototypische PDR evolueren. We hebben een kinetisch model gebouwd, waarbij rekening wordt gehouden met de meest relevante foto/chemische reacties, met behulp van de nieuwste gegevens die beschikbaar zijn voor elk molecuul. De drie individuele moleculen hebben astrofysisch-relevante groottes en zullen naar verwachting uit een familie van PAH's komen, die vrij stabiel zijn tegen straling. In het algemeen hebben we de verschillen in de verdeling van de soorten vergeleken met PAH-grootte. We hebben geconstateerd dat de variaties in de emissie worden gedomineerd door de variatie in de ionisatie-toestand van de dominante hydrogeneringstoestand van elke soort. Gezien elke PAH hier als een vertegenwoordiger van PAH's van verschillende afmetingen is bestudeerd, verwachten we dat het moeilijk is om het effect van dehydrogenering in de emitterende PAH-spectra te begrijpen, gezien dat voor iedere fysische conditie alleen PAH's binnen een klein gebied vatbaar zijn voor dehydrogenering, doordat ze snel ontdaan worden van alle H-atomen (en wellicht kunnen isomeriseren tot andere structuren zoals kooi structuren of fullerenen). Afgezien van het onderzoeken hoe PAH-emissie is gekoppeld aan de variaties in de fysische omstandigheden binnen een PDR, tackelen we ook enkele van de huidige vragen op het gebied, zoals of PAH's met extra H atomen de dragers van de $3.4\ \mu\text{m}$ band kunnen zijn en de rol van PAH's in de hoge moleculaire waterstofvormingsgraden waargenomen in PDR's. Voor de eerste vraag zien we dat PAH's met extra H-atomen waarschijnlijk niet de enige dragers zijn van de $3.4\ \mu\text{m}$ band, omdat deze soorten alleen in zeer gunstige omgevingen worden gevonden die tegengesteld zijn aan het astronomische bewijs. Wat de H_2 -vorming in PDR's betreft, zien we dat H_2 -ontvreemding van PAH's met extra H-atomen een inefficiënt proces is in vergelijking met H_2 -vorming op stofdeeltjes. We vinden echter dat foto-dissociatie van PAH's van kleine tot middelmatige afmetingen kan bijdragen aan de vorming van H_2 in PDR-oppervlakken, maar dat ze niet verantwoordelijk zijn voor de hoge H_2 -vormingssnelheden die zijn afgeleid van waarnemingen.

In hoofdstuk 4 wordt nagegaan of het deuteriumgehalte in PAH's de waargenomen variatie van de deuterium overvloed in het lokale interstellair medium kan verklaren (zie hoofdstuk 1). We hebben deze vraag opnieuw vanuit een moleculair standpunt gebaseerd op het model dat in hoofdstuk 3 is gepresenteerd. We beschouwden dezelfde drie PAH's en we hebben het kinetische model dienovereenkomstig gewijzigd om rekening te houden met reacties waarbij deuterium-atomen betrokken zijn. We vinden dat deuteratie van PAH's grotendeels volgt op de atoom (D/H) verhouding die in de gasfase beschikbaar is. Met andere woorden, de deuterium fractionering in PAH's zal hoger zijn als de (D/H) verhouding in het interstellair medium hoger is. Zo concluderen we met de recente waarnemingen van deuterate PAH's in PDR's dat de hoge deuteratie waargenomen in PDR's impliceert

dat het gasfase-reservoir ook zeer gefractioneerd moet zijn. De impliciete atoom (D/H) fractie in de gasfase is echter veel groter dan wat PDR-modellen voorspellen. Om dit te doen overeenstemmen stellen wij voor dat de hoge deuterium-fractie in PAH's de chemie kan afspiegelen die voorkomt in de koude dichte moleculaire wolken, die behouden blijft wanneer (middelgrote-tot-grote) PAH's naar de meer niet afgeschermden delen van PDR's gaan. Dit is een aannemelijke verklaring voor de deuterium fractionering met betrekking tot aromatische plaatsen, maar het kan de geobserveerde hoge fractionering van de alifatische groepen (PAH's met extra atomen, die gemakkelijk verloren gaan wanneer PAH's blootgesteld zijn aan UV-straling) niet verklaren.

Ten laatste in hoofdstuk 5 karakteriseren we PAH-emissie vanuit een nauwgezet observatie-kader. Alle vorige hoofdstukken hebben PDR's overwogen, aangezien dit de beste laboratoria zijn om PAH-uitstoot te bestuderen. In dit laatste hoofdstuk richten we ons op de PDR's van het beroemde paar nevels IC63-IC59 in de buurt van de ster γ Cas. Beide nevels hebben zeer verschillende optische verschijningen, ondanks het feit dat beide voorwerpen op soortgelijke geprojecteerde afstanden van de ster liggen. De waarnemingen bij de optische tip van deze objecten tonen aan dat de IR-uitstoot van PAH's zeer vergelijkbaar is. Deze gelijkheid is niet alleen in overeenstemming met dat beide objecten hoge dichtheidsobjecten zijn in dezelfde omgeving als de omgeving rond γ Cas, maar het is ook consistent met vergelijkbare fysische parameters, die de evolutie van het hydrogenerings- en ioniseringsniveau van de emitterende PAH-populatie bepalen. Vergeleken met andere PDR's van weerspiegelings-niveau en bekende correlaties tussen PAH's en astrofysische parameters blijkt dat zowel IC63 als IC59 tamelijk lage UV-bestraalde gebieden zijn.