Астрохимия/Космохимия
(молекулярная астрофизика)

«Неземная» химия межзвездной среды

Столяров А.В.
(кафедра лазерной химии)
http://www.chem.msu.ru/rus/chair/laser.html

2020

opyright: Francesco Antonucci

Основные задачи астрохимии

- химическая эволюция Вселенной

(и ее влияние на структуру и динамику астрономических объектов)

- астробиология

(происхождение жизни на Земле и ее поиск на других планетах)

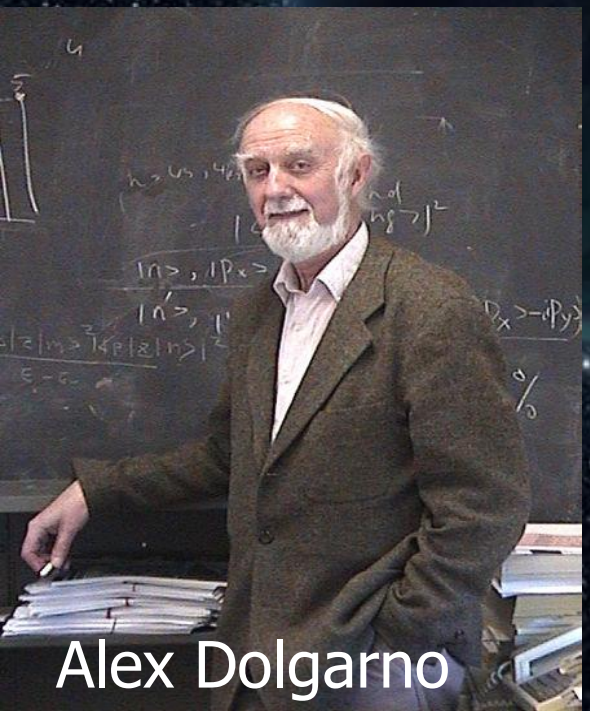


Структура астрохимических исследований

Астрономические наблюдения
(наземные и космические)

Теория и моделирование
(молекулярная спектроскопия, квантовая химия, адсорбция, кинетика и катализ, химия высоких энергий, фотохимия)

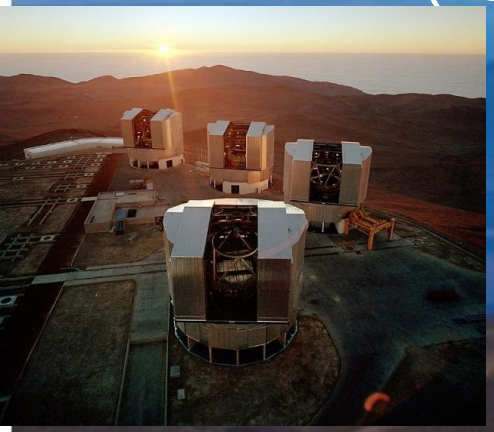
Лабораторный эксперимент
(воспроизведение/симулирование астрохимических процессов в земных условиях)



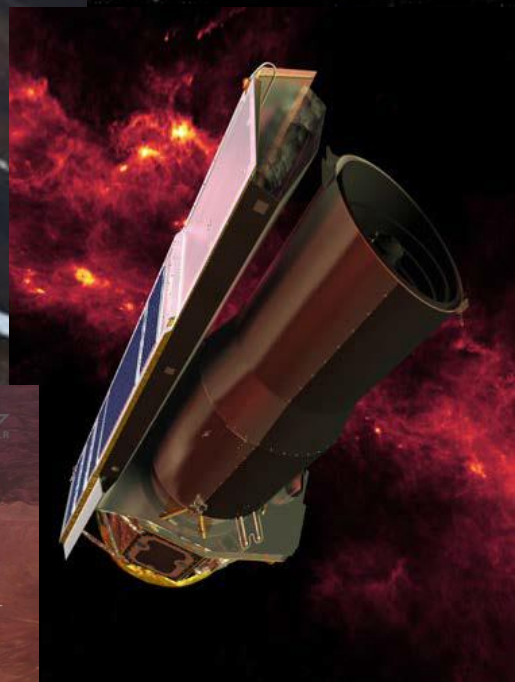
Alex Dolgarno

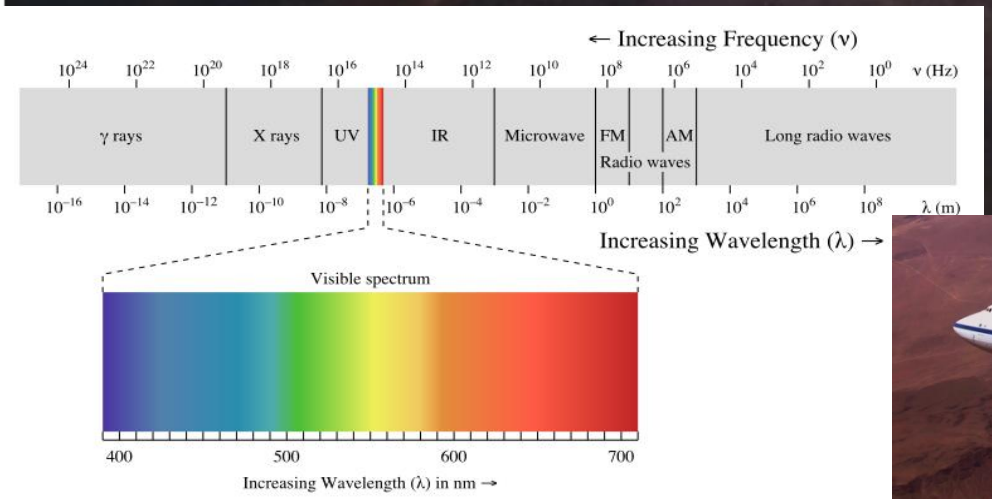
Астрономические наблюдения

(наземные и космические)





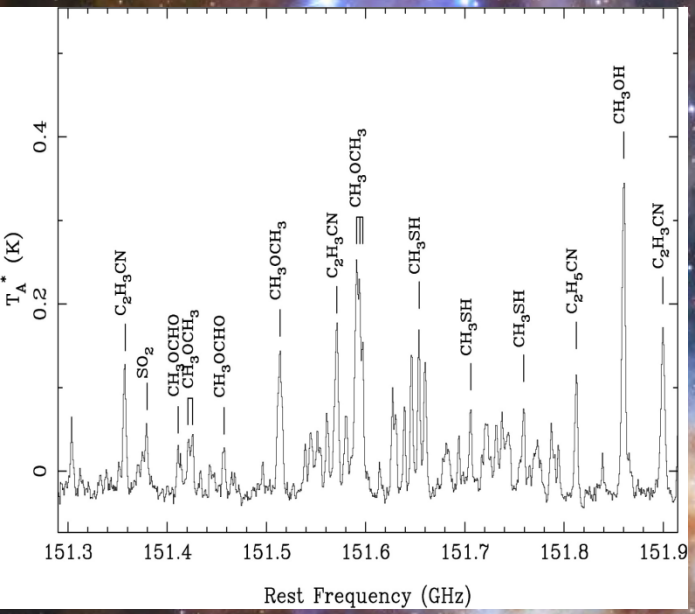


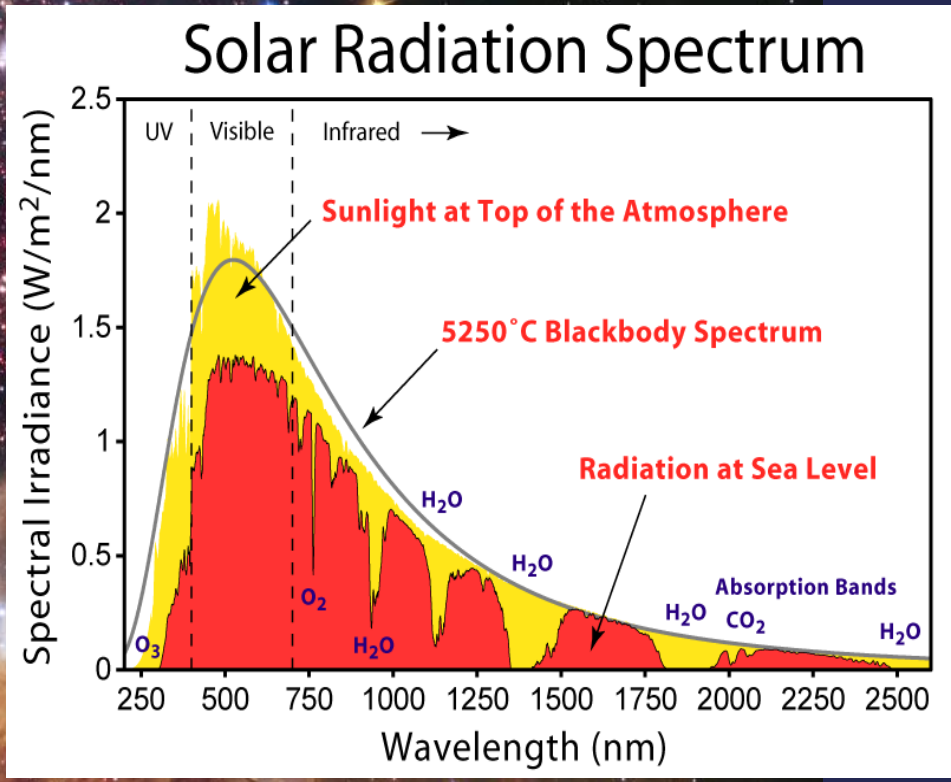




Астрономическая спектроскопия

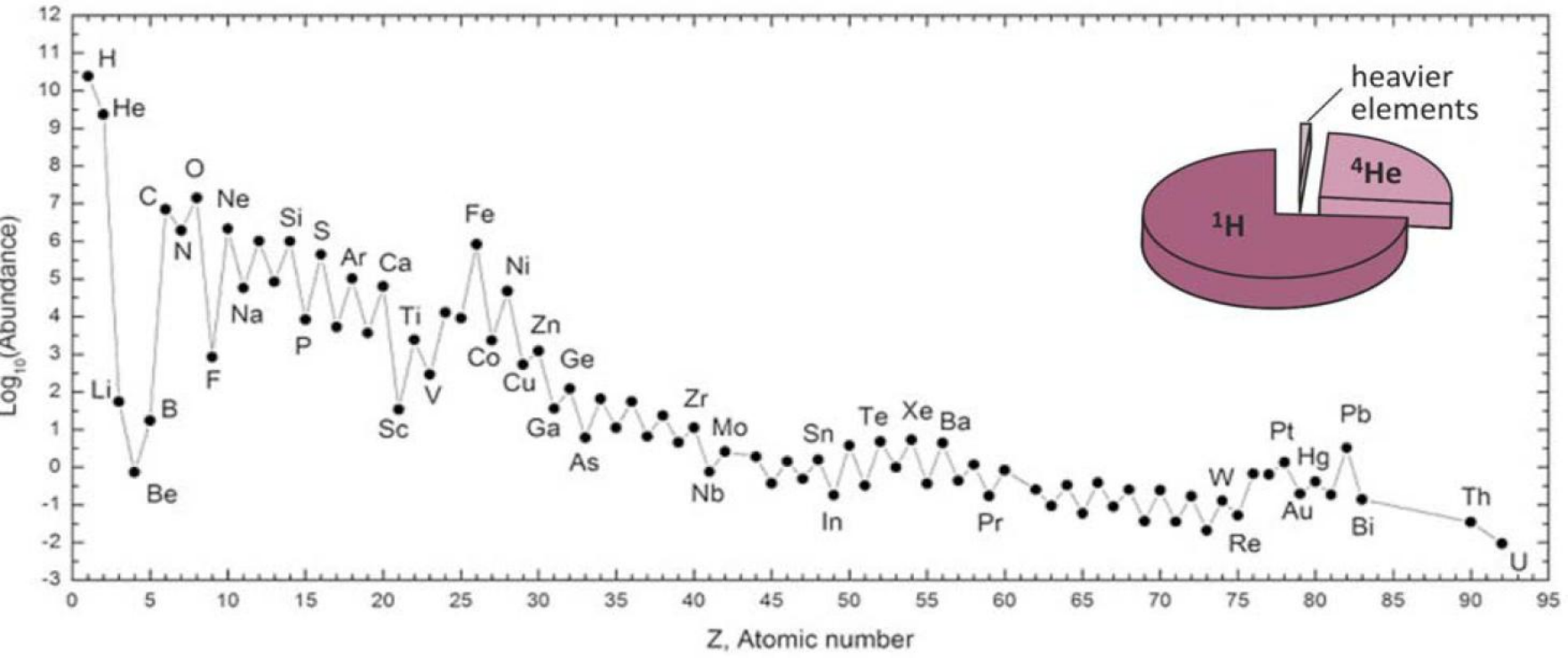
(Что можно узнать из наблюдений молекулярных спектров космических объектов?)

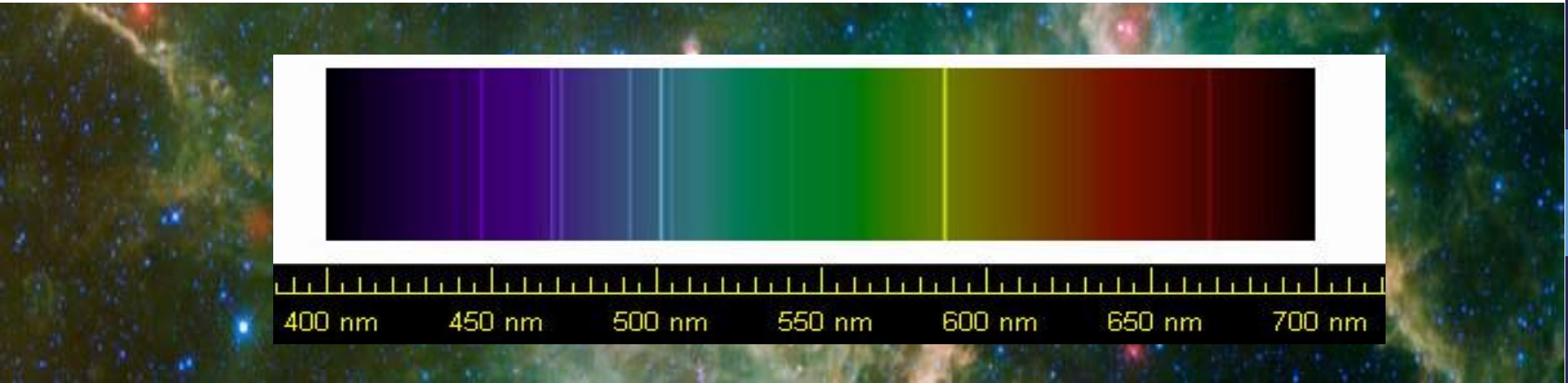




Положение -> Идентификация -> Качественный анализ
Интенсивность -> Концентрация -> Количественный анализ
Форма и ширина -> Температура и давление
Расщепление и сдвиг -> Напряженность магнитного поля

Распространенность химических элементов во Вселенной





Межзвездные молекулы

CH	CN	CH^+	OH	NH_3	H_2O	H_2CO
CO	H_2	HCO^+	CH_3OH	HC_3N	HCN	HCOOH
SiO	CS	CH_3CN	OCS	NH_2CHO	H_2S	HNCO
CH_3CHO	CH_3CCH	CH_2NH	H_2CS	HNC	SO	CH_3OCH_3
CH_3NH_2	N_2H^+	C_2H	CH_2CHCN	CH_3CH_2OH	$HCOOCH_3$	SO_2
HDO	SiS	NS	NH_2CN	HCO	C_3N	H_2CCO
C_2	HNO	CH_3CH_2CN	HC_7N	HC_5N	HC_9N	C_4H
NO	OCN^-	CH_3SH	HNCS	C_2H_4	HCS^+	$HOCO^+$
HOC^+	CH_3C_3N	SiH_4	CH_3C_4H	c-SiC_2	C_3H	HCl
C_3O	c-C_3H_2	C_6H	$HCNH^+$	MgNC	C_5H	H_3O^+
C_2S	C_3S	$(CH_3)_2CO$	NaCl	AlCl	KCl	AlF
PN	CH_3NC	C_3	c-C_3H	CH_2CN	HC_2CHO	C_5
SiC	C_2H_2	SiC_4	CO_2	CH_2	CP	l-C_3H_2
HC_2N	NH	CH_4	C_2O	HCCNC	SiN	HNCCC
SO^+	NH_2	CO^+	HC_3NH^+	H_2CN	NaCN	N_2O
MgCN	C_8H	H_3^+	H_2COH^+	C_7H	CH_3COOH	$HC_{11}N$
HF	c-C_2H_4O	LiH	C_5N	SiC_3	SH	CH_3
CH_2OHCHO	SiCN	C_4H_2	C_6H_2	C_6H_6	CH_2CHOH	AlNC
FeO	$HOCH_2CH_2OH$	NH_2CH_2COOH	N_2	CH_2CHCHO	CH_3CH_2CHO	SiNC
HC_4N	$CO(CH_2OH)_2$	CH_2CCHCN	c-H_2C_3O	CH_3CONH_2	CH_3C_6H	CH_2CNH
CF^+	CH_3C_5N	C_6H^-	O_2	C_4H^-	HCP	C_8H^-
CH_2CHCH_3	PO	CNCHO	CCP	C_3N^-	NH_2CH_2CHN	PH_3
C_5N^-	HCNO	AlO	HOCN	C_2H_5OCHO	C_3H_7CN	HSCN
AlOH	CN^-	H_2O^+	OH^+	C_{60}	C_{70}	H_2Cl^+
KCN	SH^+	FeCN				

http://www.astrochymist.org/astrochymist_ism.html

Особенности «неземной» химии

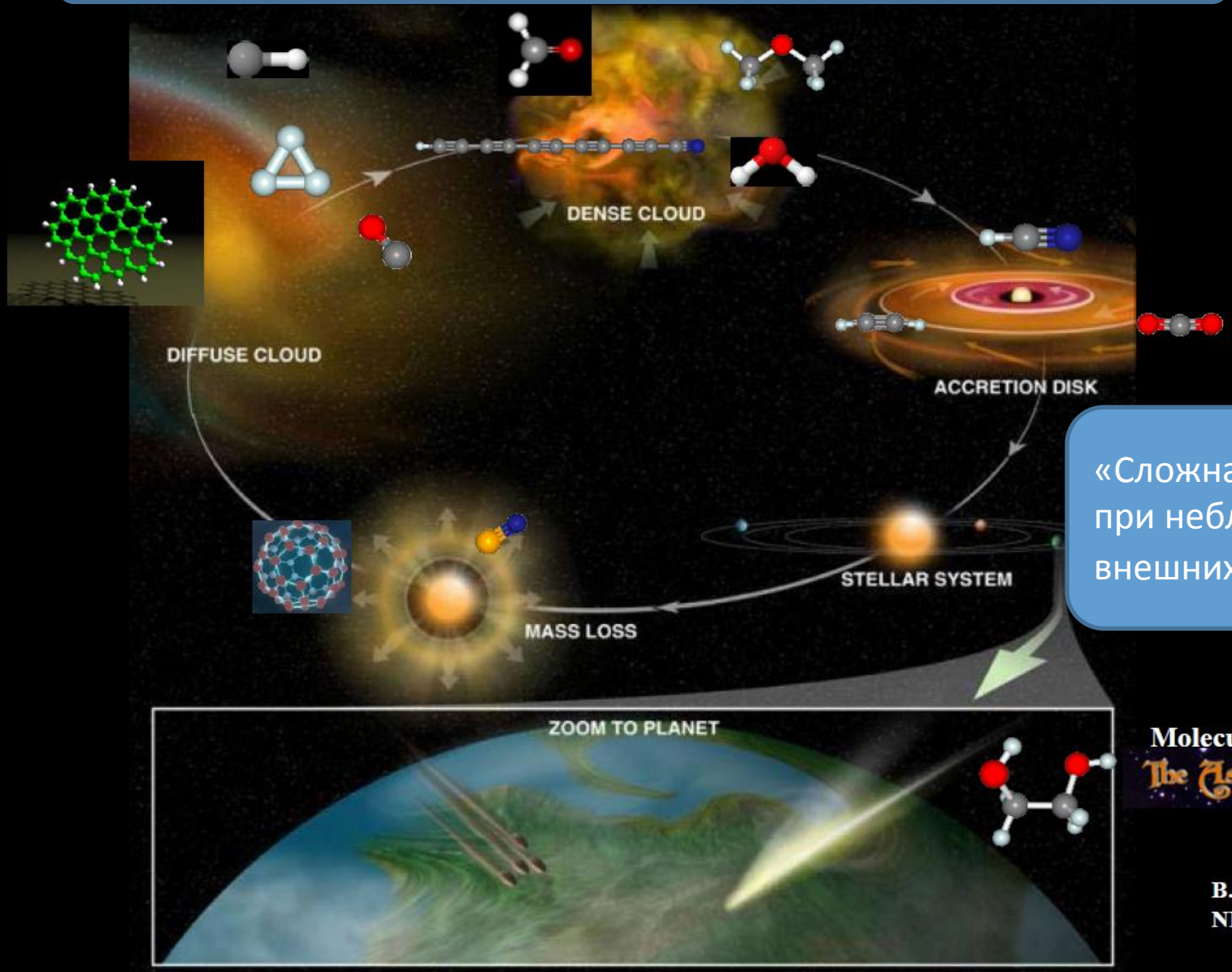
- космологические масштабы времени и пространства
- преимущественно газовая фаза + немного космической пыли
- очень низкие концентрации и давление (бестолкновительный режим)
- очень низкие или очень высокие температуры
- «жесткое» рентгеновское и ультрафиолетовое излучение
- космическое излучение (поток заряженных частиц)

Параметры межзвездной среды (МЗС)

- Диффузные облака: $T \sim 100K$, $n \sim 100\ cm^{-3}$
- Плотные облака: $T \sim 10\text{-}100K$, $n \sim 10^4\text{-}10^6\ cm^{-3}$
- Горячие ядра: $T \sim 100\text{-}1000K$, $n \sim 10^6\text{-}10^8\ cm^{-3}$
- Аккреционные диски: $T \sim 10\text{-}1000K$, $n \sim 10^8\text{-}10^{13}\ cm^{-3}$
- Ударные волны: $T \sim 200\text{-}2000K$, $n \sim 10^4\text{-}10^5\ cm^{-3}$

“Круговорот веществ” во Вселенной

От молекулярных облаков к звездам и планетам



«Сложная» химия при неблагоприятных внешних условиях

Особенности кинетики газовой фазы МЗС

- Воздействие электромагнитного излучения -> фотодиссоциация и фотоионизация

$$AB + h\nu \rightarrow A + B^*$$

- Воздействие космических лучей: столкновение с протонами и другими заряженными частицами

$$AB + c.r. \rightarrow A + B^+ + e^-$$

- Воздействие сильных ударных волн -> тепловые столкновения с тяжелыми нейтральными частицами

$$AB + M^* \rightarrow A + B^* + M$$

- Рекомбинация ионов с электронами

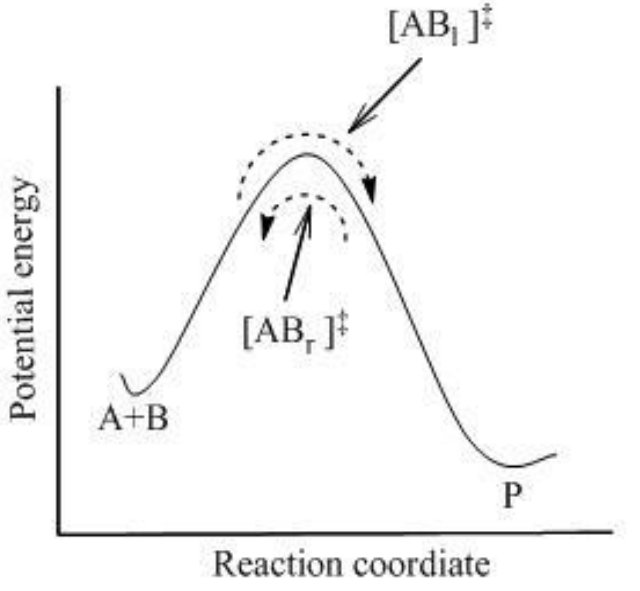
$$AB^+ + e^- \rightarrow A + B^* + h\nu$$

Образование «надтепловых» частиц

$$k_A(T) = A\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\alpha} e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Туннелирование

$$H + H_2 \rightarrow H_2 + H$$
$$D + H_2 \rightarrow HD + H$$



Кинетика ион-молекулярных реакций

$$He^+ + H_2 \rightarrow He + H^+ + H$$

$$He^+ + CO \rightarrow He + C^+ + O$$

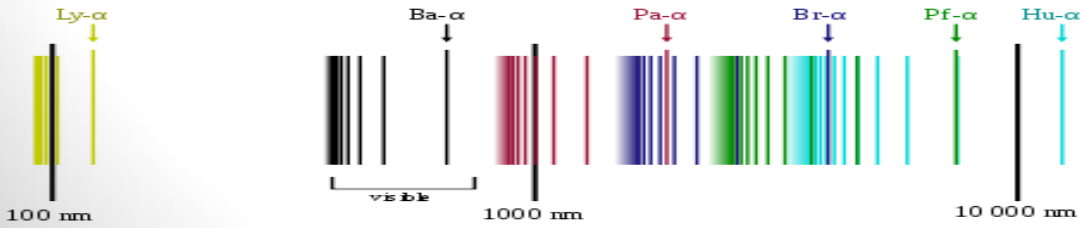
$$A^+ + H_2 \rightarrow AH^+ + H$$

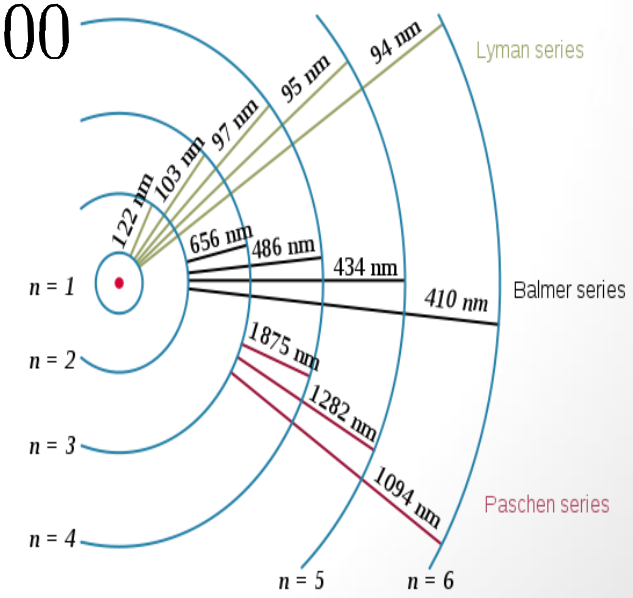
$$V(r) = -\frac{\alpha}{2r^4} - \frac{d\cos\phi}{r^2}$$



$$k_L = 2\pi e \left(\frac{\alpha}{\mu}\right)^{1/2} \quad \alpha_n \sim n^7 \quad n \sim 500$$

$$k(T) = k_L \left[1 + \left(\frac{2c^2d^2}{\pi k_B T \alpha}\right)^{1/2}\right]$$

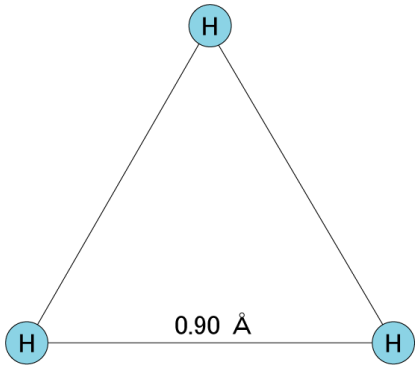


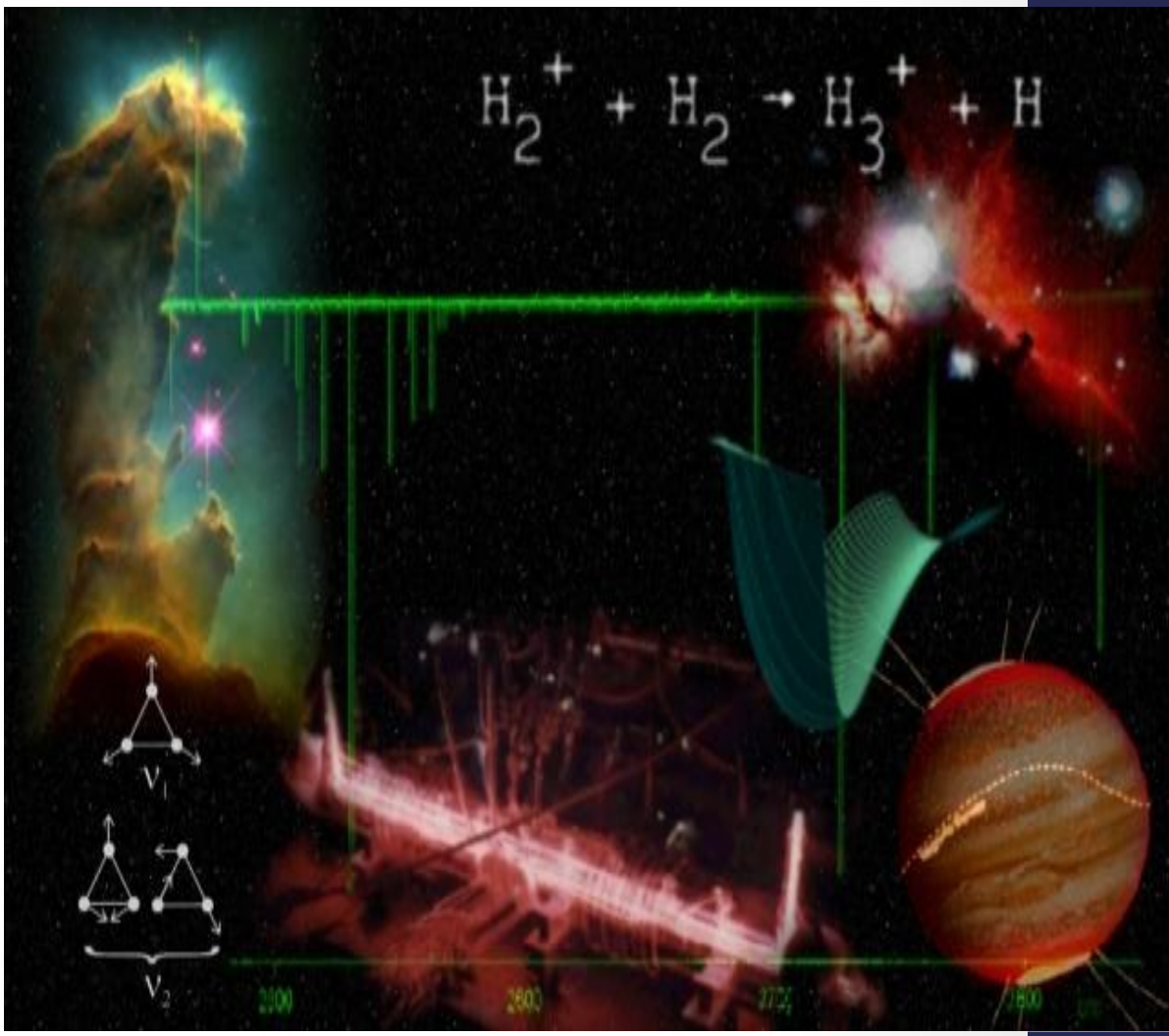


Космохимия катиона H_3^+

$$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$$

$$H_3^+ + e \rightarrow H_3^* \rightarrow H + H + H$$





$$H_3^+ + X \rightarrow XH^+ + H_2$$

$$H_3^+ + O \rightarrow OH^+ + H_2$$

$$H_3^+ + C \rightarrow CH_2^+ + H$$

$$H_3^+ + N \rightarrow NH_2^+ + H$$

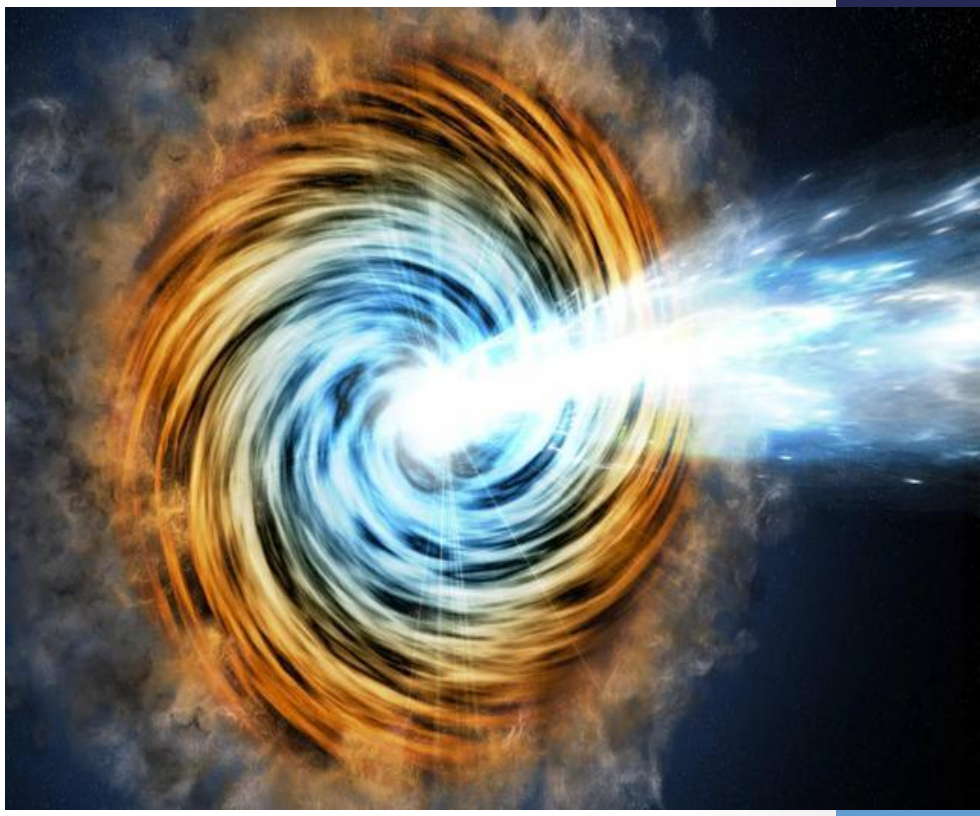
$$H_3^+ + CO \rightarrow HCO^+ + H_2$$

$$H_3^+ + HD \rightarrow H_2D^+ + H_2$$

Первые молекулы Вселенной

радиационная ассоциация

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} \rightarrow \mathrm{AB}^* \rightarrow \mathrm{AB} + h\nu.$$



$$He^+ + H \rightarrow HeH^+ + h\nu$$

$$He^+ + He \rightarrow He_2^+ + h\nu$$

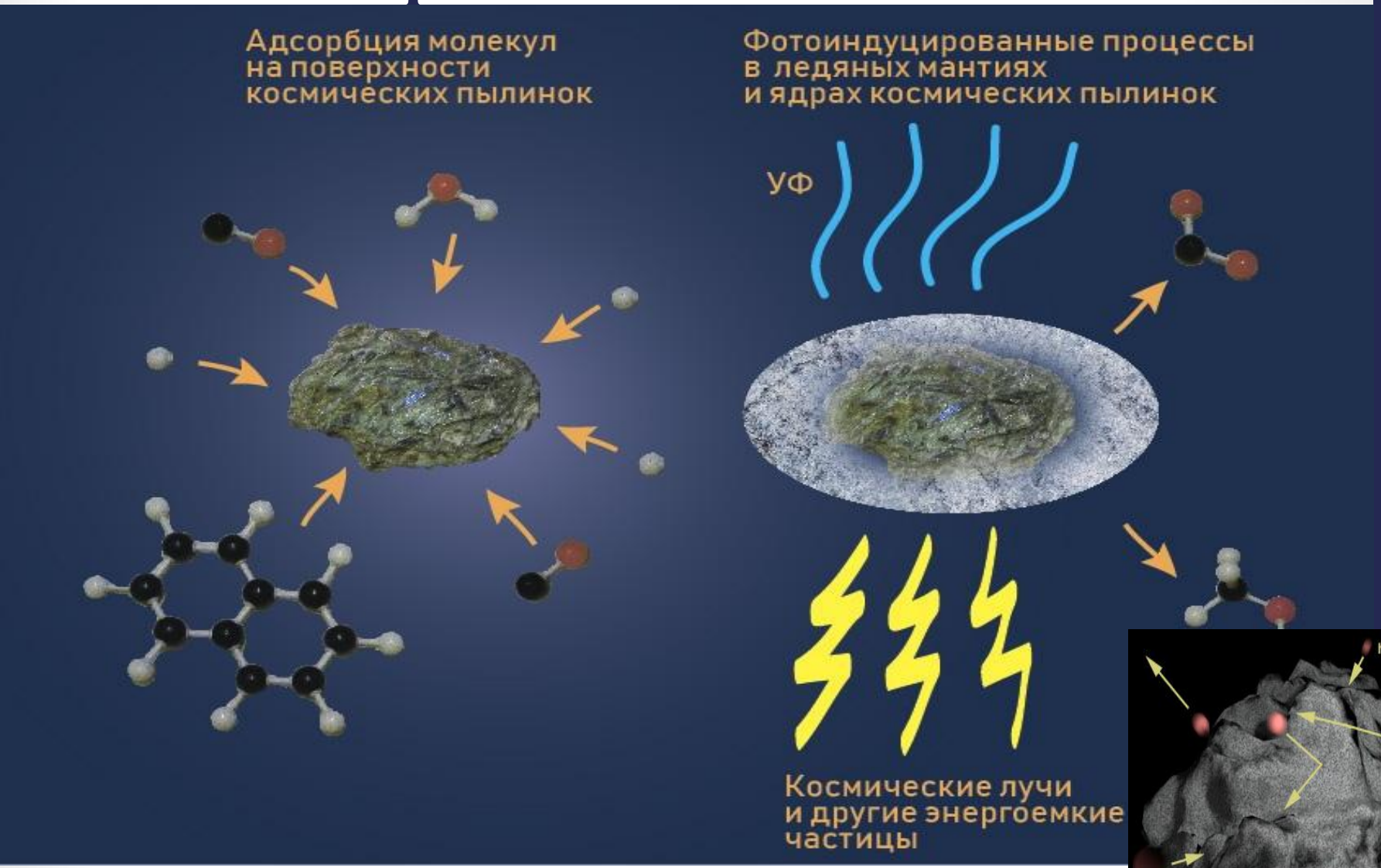
$$H^+ + H \rightarrow H_2^+ + h\nu$$

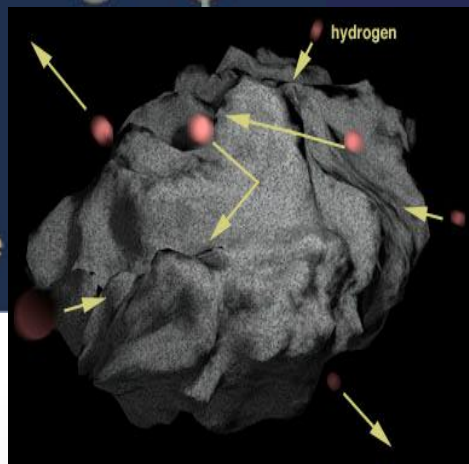
$$2H(^2S) \rightarrow H_2(^1\Sigma_g^+) + h\nu(?!)$$

$$C(^3P) + O(^3P) \rightarrow CO^* \rightarrow CO(^1\Sigma^+) + h\nu$$

$$\mathrm{C}(^3P) + \mathrm{N}(^4S) \rightarrow \mathrm{CN}(A\ ^2\Pi) \rightarrow \mathrm{CN}(X\ ^2\Sigma^+) + h\nu$$

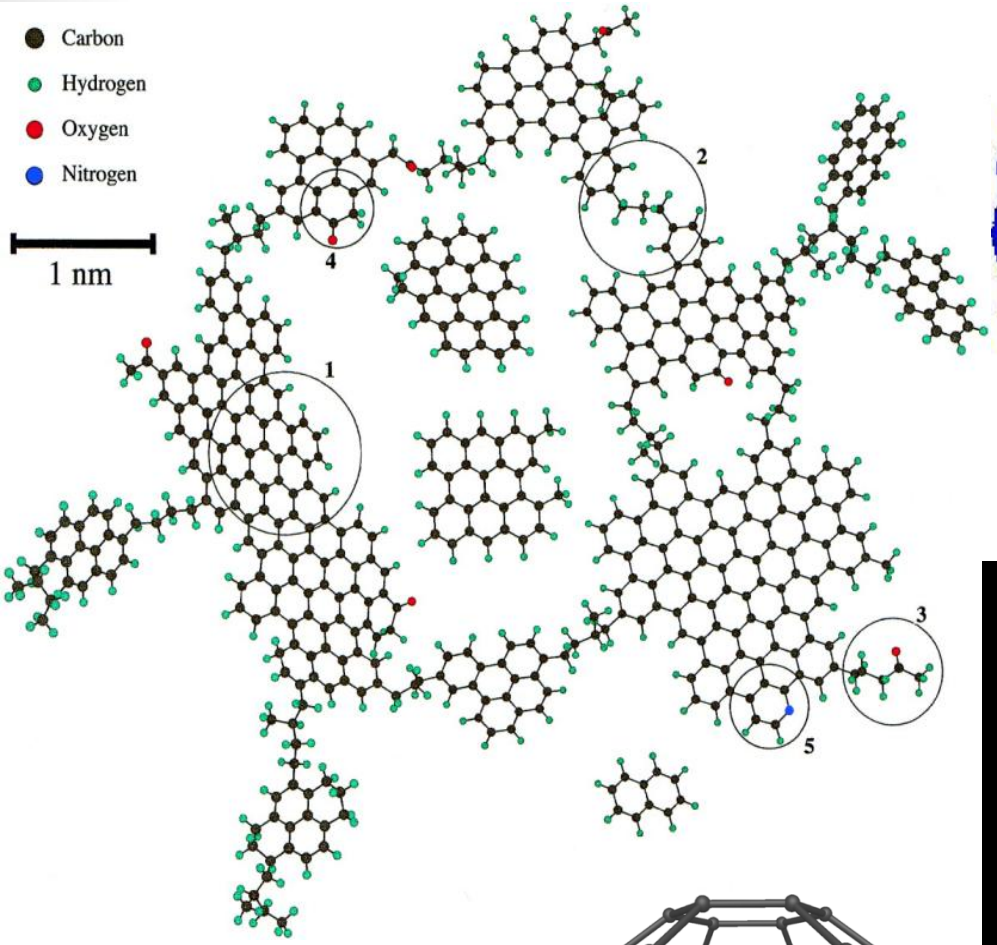
Гетерогенная химия (катализ) на поверхности космической пыли

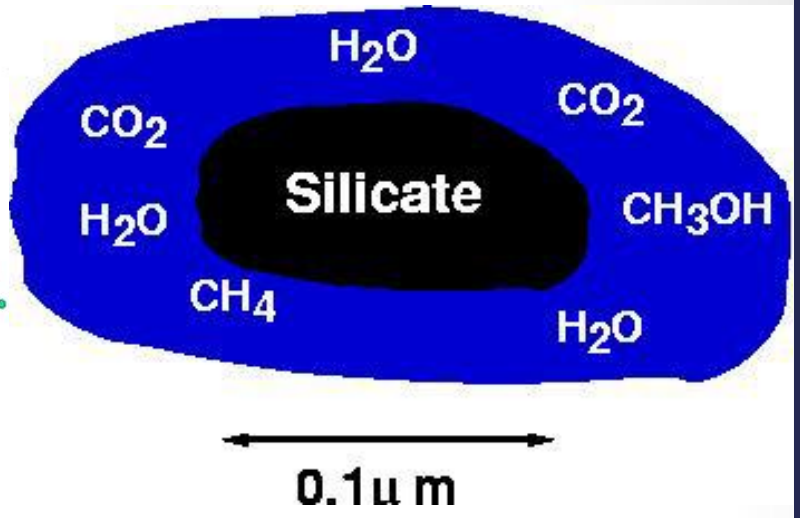


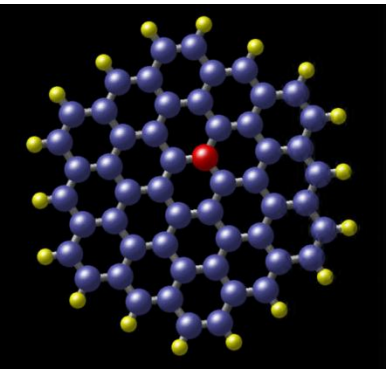


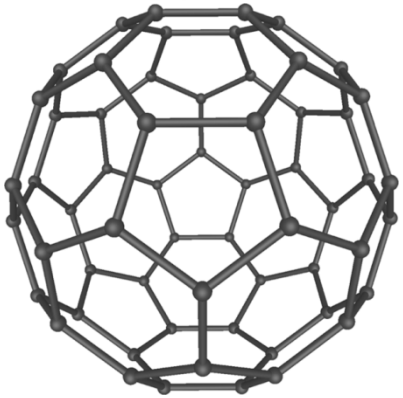
$$H + H + M \rightarrow H_2 + M^*$$

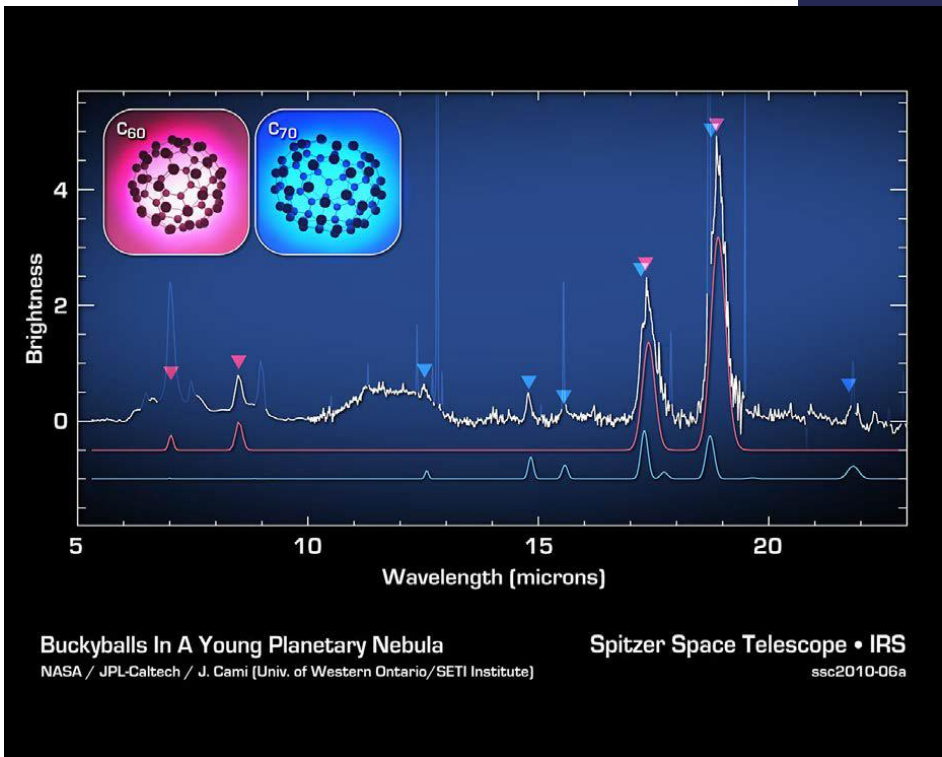
Углеродистая и силикатная пыль





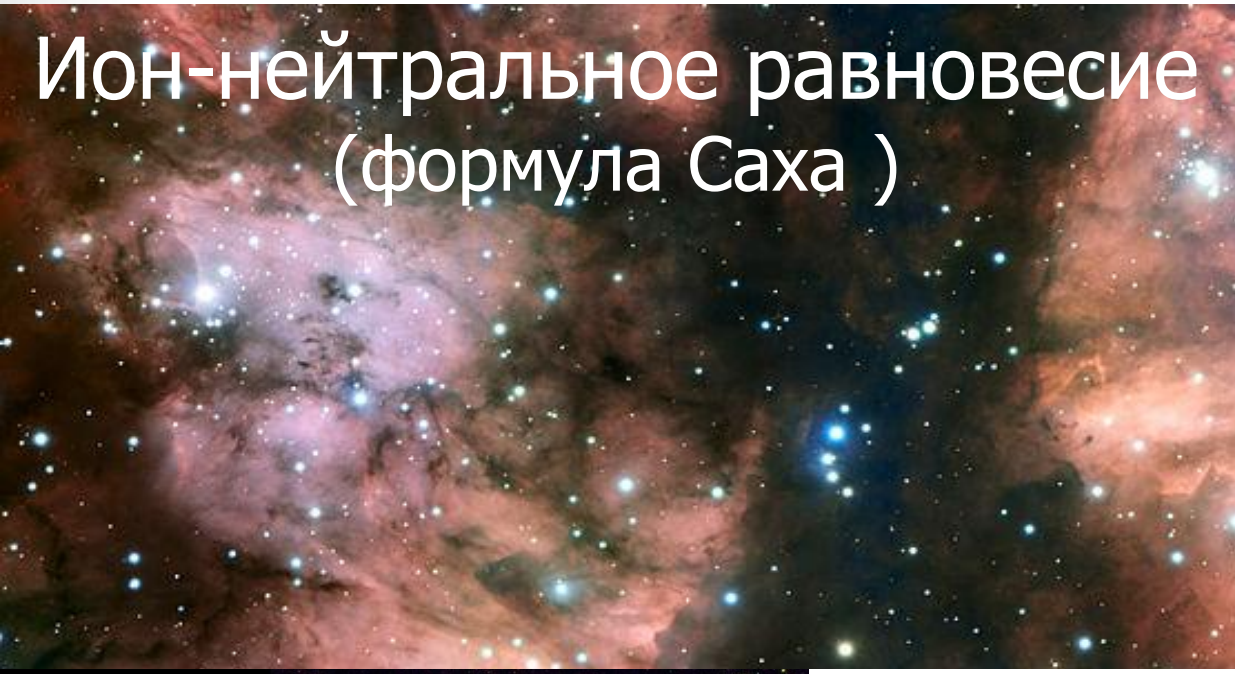


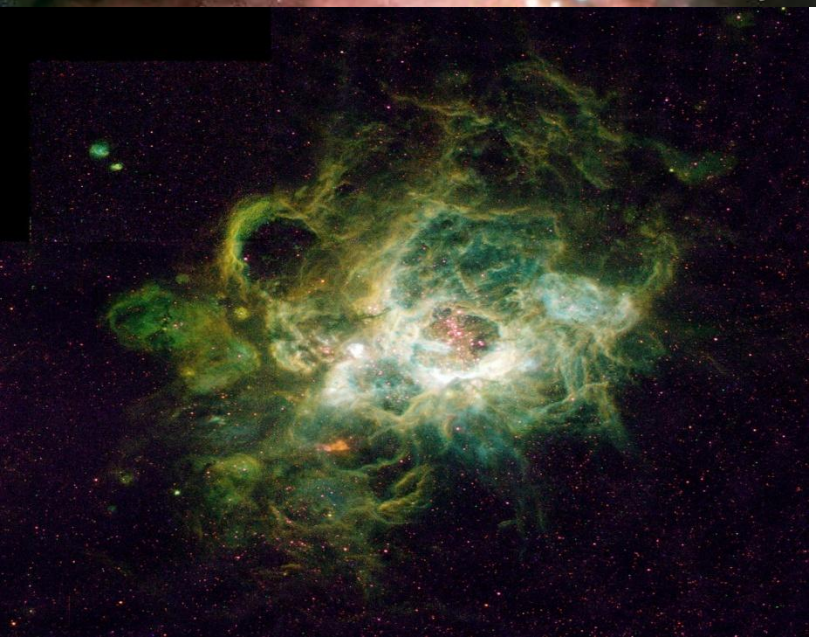


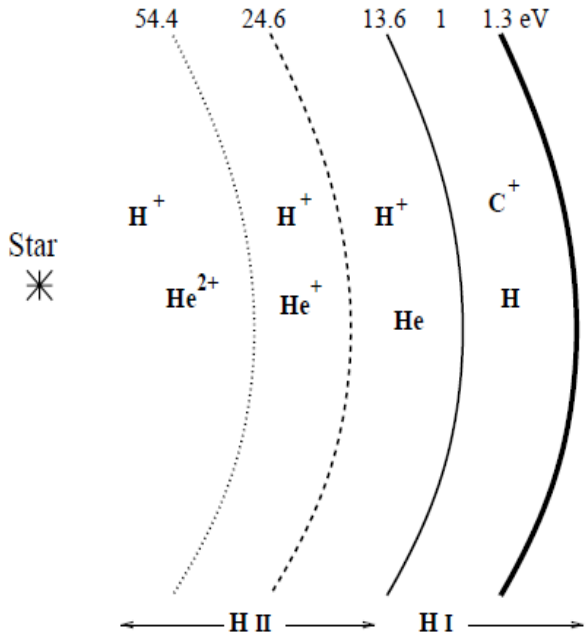


Астрохимическая термодинамика

Ион-нейтральное равновесие (формула Саха)







$$\frac{n_{i+1}n_e}{n_i} = \frac{(2\pi mkT)^{1.5}}{h^3}\frac{2g_{i+1}}{g_i}e^{-\chi/kT}$$

$$H(nl) + h\nu \leftrightarrows H^+ + e^-$$

$$He(nl) + h\nu_1 \leftrightarrows He^+ + e^-$$

$$He(nl) + h\nu_2 \leftrightarrows He^{++} + 2e^-$$

Изотопическое фракционирование
(при низких температурах)



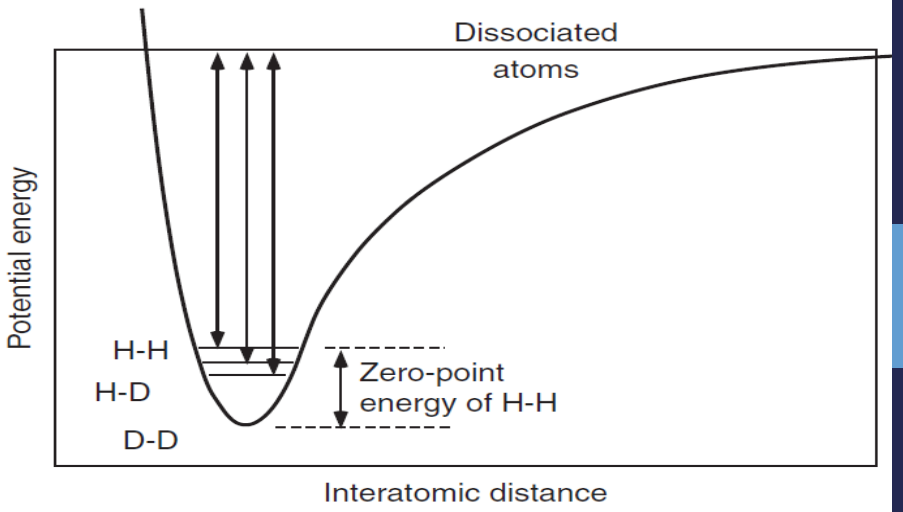
$$K_{eq} = e^{-\frac{\Delta_T G^\circ}{RT}}$$

$$\Delta G_T = \Delta H_T - T\Delta S_T$$

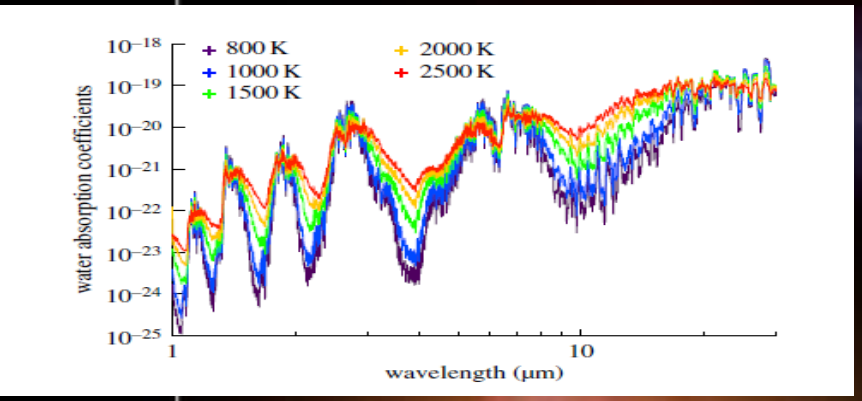
$^{13}C^+ + {}^{12}CO \leftrightarrow {}^{13}CO + C^+$

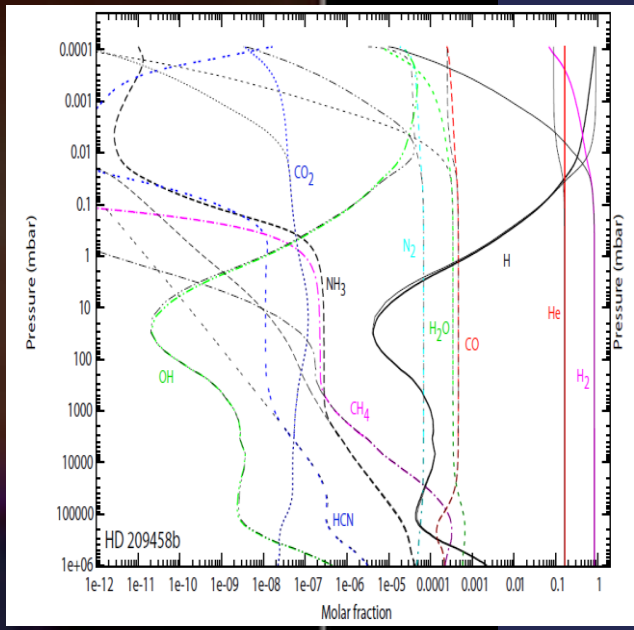
$$D + HCO^+ \rightarrow DCO^+ + H + \Delta H_T$$

$$HD + H_2O \rightarrow HDO + H_2 + \Delta H_T$$

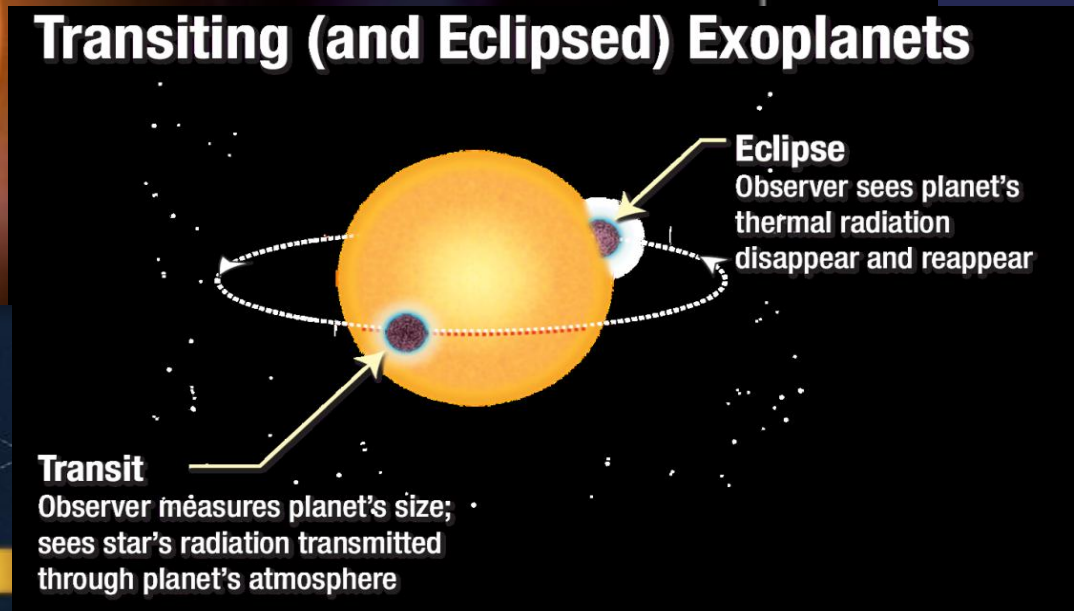


Спектральный анализ и химическое моделирование экзопланетных атмосфер









Аэрохимия гиперзвуковых плазменных потоков









Астрохимия на химическом факультете МГУ

Семестровые курсы лекций

- межфакультетский курс:
«Астрохимия – молекулы во Вселенной»

- спецкурс по выбору для химиков: «Астрохимия»
(22 лекции на YouTube: портал teach-in)

- обязательный курс для физиков-астрономов:
«Общая и физическая химия»

лаборатория «Астрохимии»
заведующий – профессор РАН
Вибе Дмитрий Зигфридович
dwiebe@inasan.ru

лаборатория «Химии высоких энергий»
заведующий – профессор
Фельдман Владимир Исаевич
feldman@rc.chem.msu.ru

Лабораторная астрохимия на химическом факультете МГУ

Теория

Оценка коэффициентов чувствительности молекулярных линий квазаров с большим красным смещением к возможной вариации фундаментальных физических постоянных (отношение массы протона к массе электрона и постоянной тонкой структуры) в космологическом масштабе времени

Квантово-химическое моделирование энергетических, радиационных и магнитных свойств астрономически важных двухатомных молекул на экспериментальном уровне точности (необходимом для задач спектральной диагностики)

Эксперимент

Исследование (лабораторная симуляция) эмиссионных оптических спектров метеоров методом лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии

Масс-спектрометрическое исследование путей и выхода продуктов лазерно-индуцированных реакций фотодиссоциации и десорбции молекул с поверхности плавленого кварца при низких температурах и глубоком вакууме

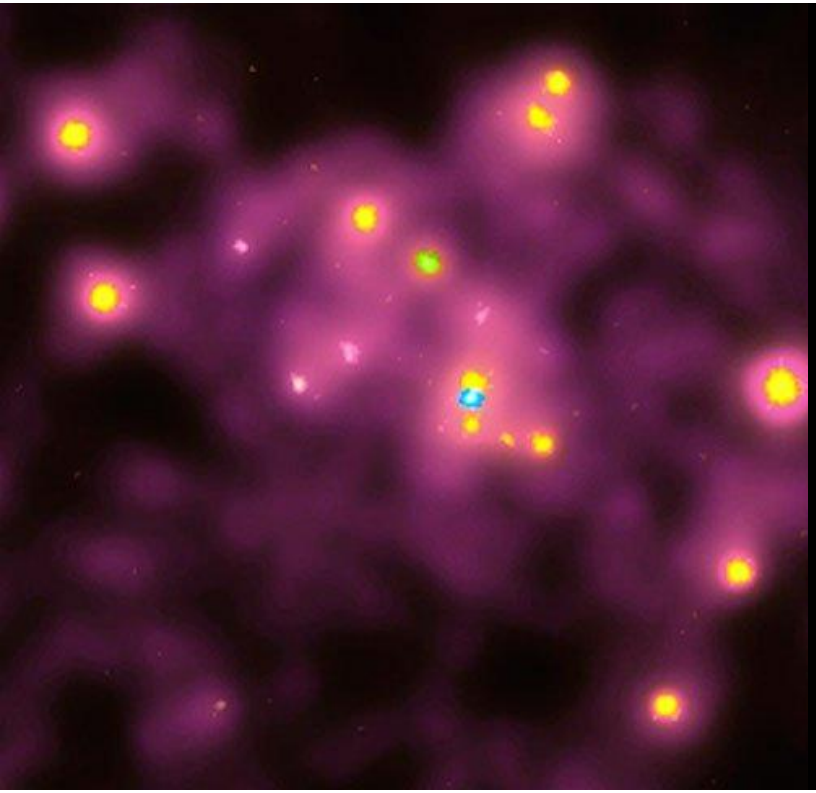
Спасибо за внимание

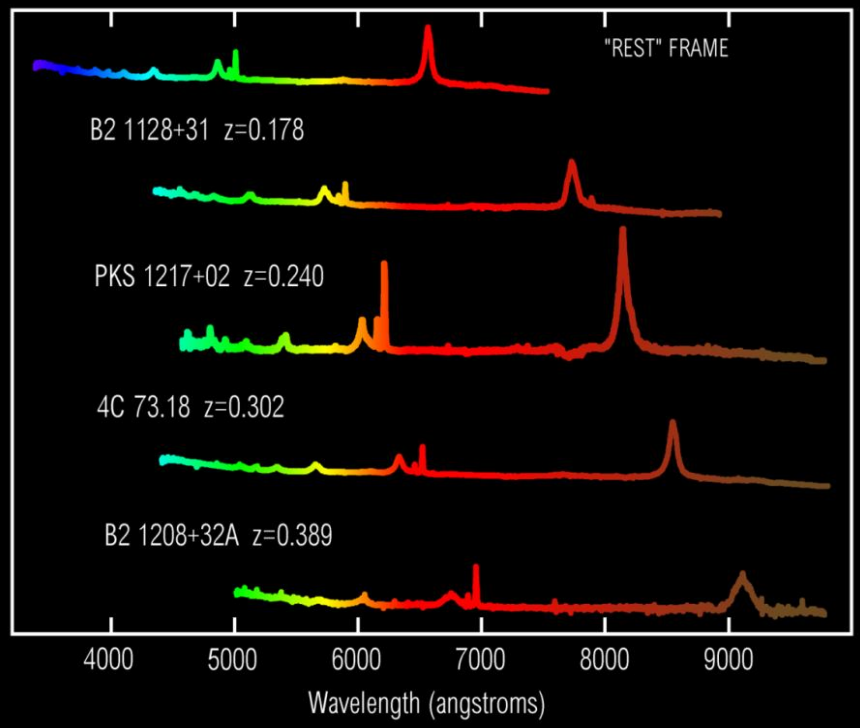
работа поддержана Российским Научным Фондом
(2018 – 2020)

«Астрохимия: от лабораторных исследований и моделирования к интерпретации астрономических наблюдений»

(грант РНФ №18-13-00269)

Изменились ли фундаментальные физические постоянные за прошедшие 12-13 миллиардов лет?



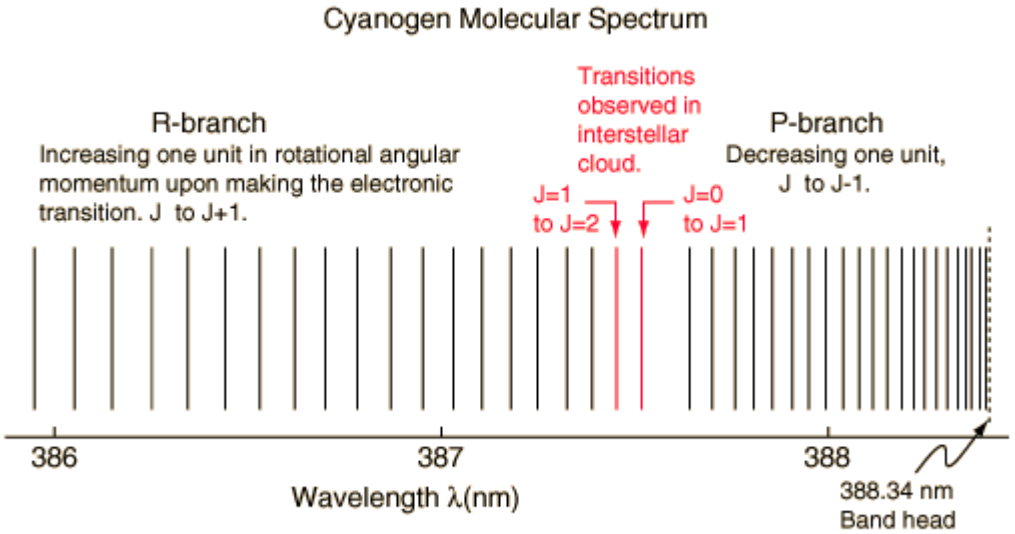


«Красное» смещение (расширяющаяся Вселенная)

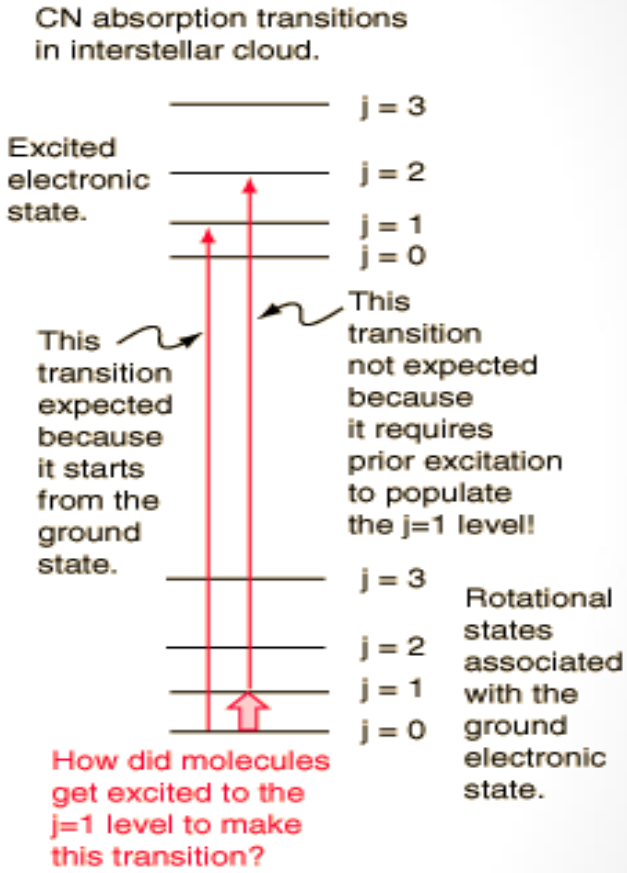


Электронный спектр поглощения радикала CN в газовой фазе МЗС

(несостоявшееся открытие реликтового излучения)



The transitions in CN in the near ultraviolet involve electronic, vibrational, and rotational transitions together. Uhler, H. S. and Patterson, R. A., Astrophys. J. 42, 434 (1915).



$$\frac{N_A}{N_B} = \frac{g_A}{g_B} \exp\left[-\left(E_A - E_B\right)/kT\right]$$

$$\frac{N_{J=1}}{N_{J=0}} = \frac{3}{1} \exp\left(\frac{2B_{v=0}}{k_B T}\right) = \frac{1}{4}$$

$$T = \frac{2B_{v=0}}{k_B \ln 12} = \frac{5 \times 10^{-4}\ eV}{k_B \ln 12} = 2.3\ K$$