

# Yıldızlararası Ortamda Bulunan Toz Parçacıklarının Farklı Astrokimyasal Süreçler Üzerindeki Etkileri

Özgün Arslan<sup>1\*</sup>, İbrahim Küçük<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Astronomi ve Uzay Bilimleri Gözlemevi Uygulama ve Araştırma Merkezi, UZAYBİMER, Kayseri*

<sup>2</sup> *Erciyes Üniversitesi, Astronomi ve Uzay Bilimleri Bölümü, Kayseri*

## Özet

Yıldızlar arasındaki ortamdaki (YAO) materyalin kimyasal özellikleri moleküler hidrojen, karbon monoksit, çeşitli radikaller ve karmaşık moleküler bağlarla bir araya gelmiş poliaromatik hidrokarbonlar ve yaşamın temelini oluşturan bazı aminoasit yapılarını da içeren kompleks organik moleküller gibi yıldızlardaki termonükleer yanma süreçleri sonucunda oluşmaları mümkün olmayan moleküller yapılarının oluşma ve yok olma etkinliklerine bağlıdır. YAO daki molekül oluşum süreçleri, gaz evresinde gerçekleşen ve toz parçacıklarının üzerinde meydana gelen reaksiyonlar olmak üzere temel olarak iki ana alt sınıfa ayrılır. YAO koşulları göz önüne alındığında gaz-evresinde meydana gelme olasılığı oldukça düşük olan bazı yüksek aktivasyon enerjili reaksiyonlar, toz parçacıklarının yüzey bölgelerinde soğurulan gaz-evresi reaktantları tarafından gerçekleştirildiğinden, toz parçacıkları üzerlerinde gerçekleşen fizikokimyasal süreçlerin etkileri kimyasal modellerinde mutlaka göz önüne alınmalıdır. Bildiri kapsamında sunacağımız çalışmamızın birinci amacı, farklı fiziksel özelliklere sahip YAO bölgelerindeki belirli molekül oluşum ve yok olma süreçlerinin analitik olarak tanımlayan astrokimyasal modeller için toz parçacıklarının kimyasal kompozisyon, boyut ve yüzey sıcaklığı gibi yapısal özelliklerinin önemlerini ortaya çıkaran literatürdeki güncel bazı teorik ve deneysel sonuçların paylaşılmasıdır. Çalışmamızın ikinci ve en önemli amacı ise, açık kaynaklı bir kod olan ASTROCHEM kimyasal modelleme kodunda yapacağımız modifikasyonlar sonunca ulaşmayı planladığımız bilimsel hedeflerimizdir.

**Anahtar Kelimeler:** galaxies: ISM, Samanyolu, Galaksiler, Kozmoloji

## 1 Astrokimyanın Önemi

Astrokimya, yaygın bulutlar, yoğun moleküler bulutlar, yıldızlı disk yapıları ve sıcak moleküler bulut çekirdekleri gibi farklı YAO larda bulunan moleküler yapıların oluşum, yok olma ve sönümle gibi süreçlerini inceleyen ve bu süreçlerin çeşitli astronomik cisimler (yıldızlardan meteorlara kadar) üzerindeki dinamik ve kimyasal evrimsel etkileri araştıran, astronomi ve kimya bilimlerinin bir arada kullanıldığı disiplinler arası bir çalışma alanıdır. Astrokimya modelleri, gözlemsel ve deneysel çalışmalar temel alınarak oluşturulur [Caselli ve Hasegawa \(1993\)](#).

YAO daki materyalin kimyasal özellikleri moleküler hidrojen, karbon monoksit, çeşitli serbest radikaller ve karmaşık moleküler bağlarla bir araya gelmiş poliaromatik hidrokarbonlar ve yaşamın temelini oluşturan bazı aminoasit yapılarını da içeren kompleks organik moleküller gibi yıldızlardaki termonükleer yanma süreçleri sonucunda oluşmaları mümkün olmayan moleküler yapıların oluşma ve yok olma etkinliklerine bağlıdır. YAO daki kimyasal bolluk değişimlerini dolayısıyla da YAO da gerçekleşen kimyasal reaksiyon oranlarını etkileyen birçok süreç bulunmaktadır. YAO kimyasal karakteristiğini belirleyen bu süreçlerin etkinlikleri gaz-evresi türlerinin kinetik sıcaklıkları, grain yüzey sıcaklığı, ortamdaki gaz ve grain yoğunluğu, UV radyasyon alanlarının şiddetleri, kozmik ışın etkileşim oranı, reaktant türlerin iyonizasyon dereceleri, belirli bir reaksiyonun gerçekleşmesi için herhangi bir aktivasyon enerjisinin olup olmaması ve ne tür reaksiyonların (ekzotermik/endotermik) göz önüne alındığı gibi birçok parametreye bağlıdır [Tielens \(2010\)](#).

YAO da gerçekleşen molekül oluşum süreçleri, gaz evresinde gerçekleşen ve toz taneciklerinin (grainlerin) üzerinde mey-

dana gelen reaksiyonlar olmak üzere temel olarak iki ana alt sınıfa ayrılabilir [Herbst ve Chang \(2005\)](#).

Molekül oluşum ve yok olma süreçlerini analitik olarak tanımlayabilmek, söz konusu süreçleri limitlendirmek ve süreçlerin YAO bölgelerinin kimyasal bollukları üzerindeki etkilerini anlayabilmek için, hangi koşullar altında ne tür moleküllerin oluşabileceğini belirlenmesi gereklidir.

Bu amaç doğrultusunda, gözlemsel veriler ve belirli analitik yöntemler temel alınarak oluşturulan kimyasal modeller kullanılarak gaz-evresi ve grain-yüzey reaksiyon oranlarını hesaplanabilir.

### 1.1 Grainlerin YAO Kimyasal Süreçlerindeki Önemleri

YAO da bulunan grainler gaz formundaki atomik ve moleküler türlerin bir araya gelebilecekleri, hareket edebilecekleri ve üzerlerinde reaksiyona girebilecekleri yüzey alanları sağlarlar.

Üzerlerine toplanan (yığılan) gaz-evresi türlerine grainler tarafından sağlanan yüzey alanları, reaktantlara ilave enerji ve momentum kazandırarak reaksiyondan reaksiyona değişen aktivasyon enerjisi bariyerlerinin daha kolay aşılmasına ve reaksiyonların daha hızlı meydana gelmesine yardımcı olurlar [Herbst ve Chang \(2005\)](#). YAO koşulları göz önüne alındığında gaz-evresinde gerçekleşmesi mümkün olmayan yüksek aktivasyon enerjili reaksiyonlar, yeterince uzun zaman ölçeğinde grain yüzey bölgelerinde soğurulan (tutulabilen) gaz-evresi kökenli reaktantlar veya grain-yüzey reaksiyonları sonunda oluşan yeni reaktantlar tarafından gerçekleştirilebilir [Tielens \(2010\)](#).

Grain boyut dağılımının en büyük yüzdesini oluşturan 0.03 - 3  $\mu\text{m}$  aralığında yarıçap değerlerine sahip olan heterojen yüzey geometrilili ve küresel yapıda olmayan grain yapıları, silikat ve karbon materyalden veya belirli oranda silikat ve karbon karışımı

\* oarslan@erciyes.edu.tr

içeren kompleks materyallerden oluşmaktadır. Moleküller bu lutların merkezi bölgeleri gibi düşük sıcaklıklı ( $T < 100$  K) ve yüksek yoğunluklu ortamlarda ( $n > 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ) grainlerin yüzeyleri, yığılma süreçleri ve grain yüzey reaksiyonları tarafından oluşan  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NH}_3$  ve  $\text{H}_2\text{CO}$  gibi moleküller içeren bir veya birden fazla katmanlı buz mantolarıyla kaplanabilirler Caselli ve Hasegawa (1993).

Ortam yoğunluğuna, grainlerin yüzey sıcaklığına ve grainlerin radyasyon alanlarından gelen enerjik UV fotonlardan ne kadar korunduğuna bağlı olarak, grainlerin yüzeylerini kaplayan buz katmanları 100-150 adet alt katman (monolayer) bileşeni içerebilir Cuppen (2017).

## 1.2 Grain Yüzey Reaksiyonlarına Etki Eden Süreçler

### 1.2.1 Yığılma:

Gaz-evresi türlerinin grainler üzerine yığılma miktarı, gaz-evresi türleriyle grainler arasındaki çarpışma sıklığına ve grain yüzeyine tutunma katsayısı tarafından belirlenir.

Tutunma katsayısı veya tutunma olasılığı, göz önüne alınan türün kinetik (veya termal) enerjisini grain yüzeyine ne kadar iyi aktarabildiğiyle ilişkilidir.

Yığılan türün termal enerjisinin grain yüzeyine aktarılma etkinliği grain tarafından soğrulan atom ya da molekülün görelî kütlesine, gaz sıcaklığına ve tutunmanın gerçekleşmesi için aşılması gerekli belirli bir bariyer enerjisinin olup olmadığına bağlıdır Cuppen (2017).

### 1.2.2 Yüzeyden Atılma (Desorption) Süreçleri:

Grainler üzerinde bulunan türlerin grain yüzeylerinden gaz-evresine atılması süreçleri termal ve termal olmayan mekanizmalar tarafından kontrol edilir. Termal atılma etkinliği yıldız oluşumu, adiyabatik ısınma ve şok dalgaları gibi süreçler nedeniyle meydana gelen grain yüzey sıcaklığındaki artışa bağlıyken, termal olmayan atılma etkinliği grainlerin UV foton soğurması nedeniyle gerçekleşen foto-atılma süreçleri Fayolle (2004), kozmik ışın-grain çarpışmaları veya kozmik ışınlar tarafından iyonize gaz-evresi türlerine ait serbest elektronların grainlerle çarpışmaları nedeniyle grain yüzey sıcaklığını artması Herbst ve Chang (2005) ve grain yüzeyinde meydana gelen ekzotermik reaksiyonlar sonucunda açığa çıkan ilave enerjinin reaksiyon ürünlerinin ya da daha önceden var olan diğer moleküllerin yüzeyden atılmalarını sağlaması (kimyasal atılma) gibi birçok farklı mekanizmaya bağlı olabilir Oberg (2009).

### 1.2.3 Kimyasal (Reaktif) Atılma:

Kimyasal veya reaktif atılma, grainlerin yüzeylerinde gerçekleşen ekzotermik reaksiyonlar sonucunda açığa çıkan ekstra enerjinin reaksiyonlar sonucunda oluşan ürünlerin veya yeni oluşan ürünlerin yakınında bulunan diğer moleküllerin/atomların yüzeyle arasındaki elektrostatik veya kimyasal bağların kopmasına neden olması olarak tanımlanabilir Garrod ve Herbst (2006).

### 1.2.4 Foto-Atılma Süreçleri:

Buz katmanlarına sahip grainlerin UV veya X-ışın radyasyonu etkileşmesi (foton soğurması) sonucunda meydana gelen foto-kimyasal atılma ve dağılma reaksiyonları nedeniyle grain yüzeylerindeki bazı moleküller gaz-evresine atılabilir. Buz mantoya sahip grainlerin yüzeylerinde gerçekleşen foto-kimyasal süreçler (atılma-dağılma-uyarılma) sırasında ortaya çıkan reaktif özel-

ikleri oldukça fazla olan serbest radikal türler arasındaki rekombinasyon ve ekzotermik kompleks molekül oluşum reaksiyonlarının sağladıkları ilave enerji grain yüzey mantolarının kısmen veya tamamen gaz-evresine atılmasına neden olabilir Oberg (2009).

### 1.2.5 Grain Yüzeylerindeki Kozmik Işın Etkileşimleri:

Kozmik ışın grain etkileşimleri sonucunda grainlerin tüm yüzey alan bölgeleri boyunca meydana gelen ani sıcaklık artışları ( $> 70\text{K}$ ) Ivlev (2015) veya kozmik ışın grain çarpışmaları nedeniyle grainlerin yüzeylerinde oluşan lokal sıcak bölgeler (hot-spots) grainler üzerinde bulunan moleküler türlerin gaz-evresine atılmasına neden olabilir Leger (1985).

## 2 ASTROCHEM Kodu

Astrochem, YAO da bulunan kimyasal türlerin bolluklarındaki değişimleri zamanın fonksiyonu olarak hesaplayan C programlama dilinde yazılmış açık kaynaklı bir koddur. Belirli gaz-evresi ve grain-yüzey (katı-evre) kimyasal reaksiyonları sonunda meydana gelen kimyasal bolluk değişimlerinin çökme ve ısınma gibi dinamik evrim süreçleriyle birlikte incelenmesi amacıyla tez kapsamında kullanmayı planladığımız araçlardan birisi olan Astrochem kodu farklı fiziksel özelliklere sahip birçok astronomik cisimim kimyasal karakteristiğinin teorik olarak çalışılması için geliştirilmiştir <sup>1</sup>.

Astrochem, ilk olarak farklı türdeki birçok kimyasal reaksiyon (birkaç bin) içeren bir reaksiyon ağında göz önüne alınan kimyasal reaksiyonlar sonucunda değişen kimyasal bollukları analitik olarak ifade eden reaksiyon oranlarını (kimyasal kinetik reaksiyon oranlarını) içeren matris yapıları bir denklem sistemi oluşturur. Daha sonra ise kod, belirli bir zaman aralığı limitinde farklı reaksiyon süreçleri için adım aralıkları Newton iterasyonu ile belirlenen değişken zaman ölçekleri kullanarak diferansiyel denklem sisteminin nümerik integrasyonunu yapan bir solver (CVODE) yardımıyla reaksiyona giren türlerin ve reaksiyonlar sonucunda oluşan ürünlerin kimyasal bolluk değerlerini zamana bağlı olarak hesaplar.

Belirli bir YAO bölgesi için tanımlanan bir reaksiyon ağındaki gaz-evresinde bulunan atomik ve moleküler reaktantlar arasında gerçekleşen termal reaktif reaksiyonlar, foto-kimyasal reaksiyonlar ve kozmik ışın etkileşimleri gibi farklı süreçler sonucunda değişen kimyasal kompozisyonun zaman bağlı değişimlerinin Astrochem aracılığıyla hesaplanabilmesi için dört temel veri türü gereklidir.

Birinci veri türü, reaksiyon ağındaki türlerin başlangıç kimyasal kompozisyonlarıdır. İkinci veri türü, kimyasal yapısı incelenen YAO bölgesinin fiziksel özelliklerini belirleyen yoğunluk, sıcaklık, sönümlenme katsayısı, UV radyasyon alanı şiddeti ve kozmik ışın iyonizasyon oranı gibi parametrelerdir. Üçüncü veri türü, ikinci veri türünü oluşturan fiziksel parametrelerin incelenen YAO bölgesinin dinamik evrim durumuna bağlı olarak belirli gradientlere (zamansal değişimlere) sahip olup olmadıklarıdır. Dördüncü veri türü ise, göz önüne alınacak reaksiyon türlerini içeren OSU <sup>2</sup> ve KIDA <sup>3</sup> gibi reaksiyon veri tabanlarından alınan reaksiyon ağı bilgisidir.

<sup>1</sup> <http://astrochem.readthedocs.io/en/latest/usermanual.html>

<sup>2</sup> <http://faculty.virginia.edu/ericherb/research.html>

<sup>3</sup> <http://kida.obs.u-bordeaux1.fr/>

### 3 ASTROCHEM Koduna Eklenmesi Planlanan Fonskiyonlar

#### 3.0.6 Astrochem koduna eklenmesi planlanan ilave fonskiyonlar şöyle sıralanabilir:

- Grainlerin üzerine yığılma süreçlerinin reaksiyon ağına eklenmesi.
- Grainlerin yüzeylerinde bulunan radikal türlerin görel olarak daha kararlı hidrojen atomu içeren moleküller türlerine dönüşümünü sağlayan hidrojen yakalama reaksiyonları ve hidrojen atomlarının veya OH moleküllerinin yüzeyde bulunan hidrojen içerikli diğer moleküller türlerindeki hidrojen atomu bileşenlerini kendilerine bağlamalarıyla gerçekleşen hidrojen çalma reaksiyonları başta olmak üzere olası bazı grain-yüzey reaksiyonlarının reaksiyon ağına eklenmesi.
- Grain-yüzey reaksiyonları için tek bir yüzey sıcaklığı ve grain boyutu değerleri yerine, belirli bir yüzey sıcaklığı ve boyut dağılımının kullanılması.
- Bir grainin yüzeyinde bulunan belirli bir türün yüzeye bağlanma (veya yüzeyden atılma) sürecini kontrol eden yüzey bağlanma enerjisini tek bir değerle tanımlamak yerine bağlama enerjisi için belirli bir enerji dağılım fonksiyonunun kullanılması.
- Bir grainin yüzeyinde bulunan belirli bir türün yüzey alanları arasındaki hareket kabiliyetini belirleyen difüzyon enerjisi değeri için belirli bir dağılım fonksiyonunun (yüzey bağlanma enerjisine benzer şekilde) kullanılması.

#### Kaynaklar

- Caselli, P., Hasegawa, T, I., Herbst, E.: chemical differentiation between the orion hot core and compact ridge.ASP Conference Series. **35** (1993) 154–156
- Cuppen, H.M.: grain surface models and data for astrochemistry.Space Science Reviews. **212** (2017) 1–58
- Fayolle, Edith.: photodesorption of interstellar ices: a wavelength-dependent approach to unveil molecular mechanisms.American Astronomical Society Meeting. **224** (2004) id:205.04
- Garrod, R, T., Herbst, E.: formation of methyl formate and other organic species in the warm-up phase of hot molecular cores. Astronomy and Astrophysics. **457** (2006) 927–936
- Herbst, E., Chang, Q.:chemistry on interstellar grains. Journal of Physics: Conference Series. **6(1)** (2005) 18–35
- Ivlev, A. V., Röcker.:impulsive spot heating and thermal explosion of interstellar grains revisited. The Astrophysical Journal. **805** (2015) 59(9pp)
- Leger, A., Jura, M., Omont, A.:desorption from interstellar grains. Astronomy and Astrophysics. **144** (2005) 147-160
- Oberg, Karin ,I., Linnartz, Harold.:photodesorption of ices. I. H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O. The Astrophysical Journal. **693** (2009) 1209-1218
- Tielens, A, G, G, M.:The Physics And Chemistry Of The Interstellar Medium.Cambridge University Press . (2010) pp:495

#### Erişim:

043-1420: [UAK-2018 Program](#) — [UAK Bildiri](#) — [Turkish J.A&A](#).