c-SiCsub3sub分子在AGB星周包层中形成机理研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/6334.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

c-SiCsub3sub分子在AGB星周包层中形成机理研究取得进展。近日，一项关于c-SiC3等含硅分子在渐近巨星分支(AGB)恒星IRC+10216星周的形成机理的研究结果发表于《美国国家科学院院刊》。该成果是原子分子与化学动力学实验、量化计算、天体化学模拟强强联合、共同攻关的一个典型例子，展示了天体化学这门新兴学科“高度交叉融合”的本质特点。此项工作由华东师范大学精密光谱科学与技术国家重点实验室研究员杨涛、中国科学院新疆天文台天体化学团组研究员李小虎，及美国加州大学伯克利分校、夏威夷大学等的科学家合作完成。

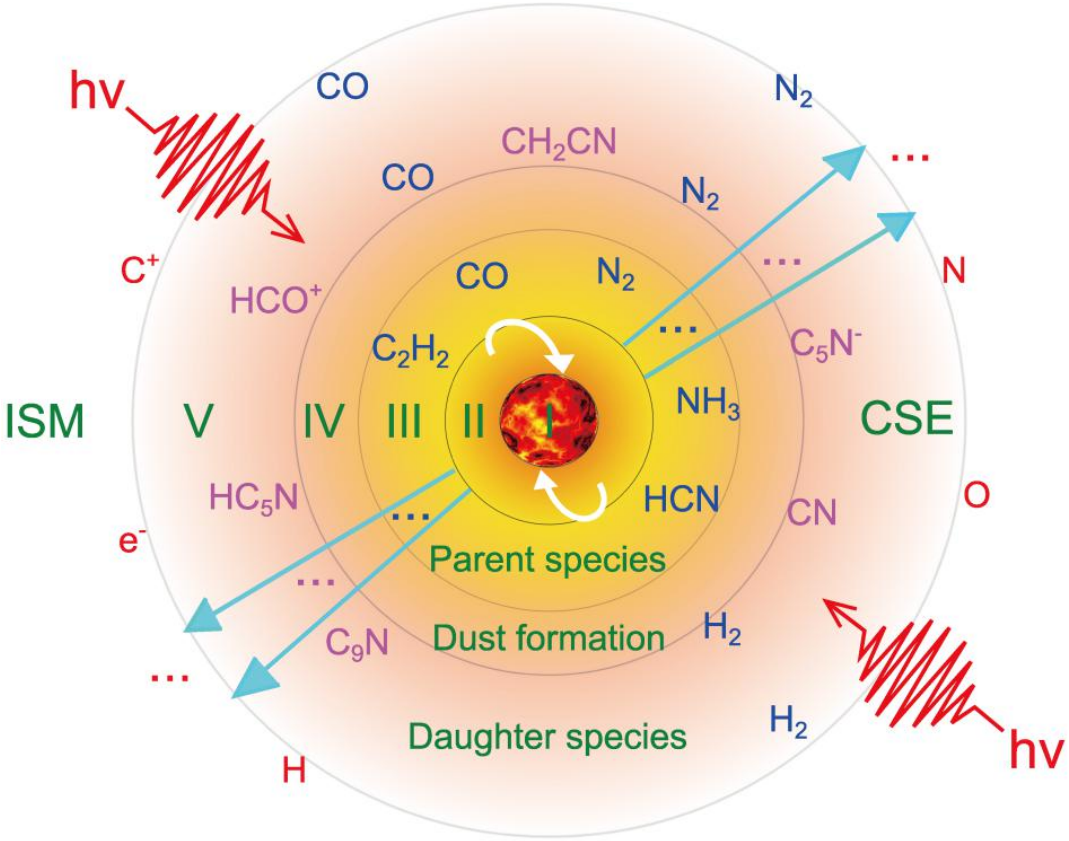
AGB星是演化到晚期的恒星。它们以星风的形式不断向其星周抛射气体分子和尘埃，形成一个致密而温暖的星周包层，是宇宙中著名的“分子工厂”，尤其是距离地球最近的富碳AGB星IRC+10216。迄今为止，太空中已发现约200种星际分子，其中一半以上都可以在IRC+10216这一颗AGB星的星周探测到。近年来，AGB星周分子的相关研究引起了越来越多的实验物理学家、理论化学家以及天体化学家的兴趣。

在该项目实验方面，研究人员制备了Si(3P)、Si(1D)和SiH(X2Π)三种原子和分子束，并通过激光诱导荧光光谱标定它们相应的量子态。实验发现，Si(3P)与CH2CCH2或CH3CCH在碰撞能量30 kJ mol-1的条件下无法反应，而Si(1D)和SiH(X2Π)却可以与它们反应，但反应机理也各不相同。通过精确控制气相分子动力学的方法，研究者研究了Si(1D)与CH2CCH2或CH3CCH的反应能与势垒、中间态分子结构等重要信息及各种可能的反应，最终发现H2解离的通道为最主要的反应通道。量化计算方面，通过ωB97X-V 密度泛函与cc-pVTZ基组对反应物、中间态和最终产物的结构进行了几何优化和频率计算。对过渡态的搜索，使用freezing string方法生成一个初始态结构与Hessian矩阵，之后使用P-RFO eigenvector following方法对过渡态结构进行优化，最后通过频率计算确认最终的过渡态。通过高精度的量化计算，科研人员甄别出了H2C=C=C=Si与c-SiCH=C=CH等主要分子的产物通道，以及在Lyman-α光子作用下生成c-SiC3(X1A1)等分子的光解通道。天体化学模拟方面，将实验和量化计算所得到的反应结果成功应用于AGB星周化学反应网络模型，细致研究了c-SiC3分子、SiC4分子、SiC3H2分子、CH3CCH分子及其同分异构体在IRC+10216星周的空间分布、形成和解离机制并给出了它们的丰度和柱密度等信息，为未来可能的天文观测提供重要依据。

近年来，射电天文领域进展迅速，高灵敏度和分辨率的望远镜不断建成并成功运行，极大地促进了天体化学领域的迅速发展。高性能的射电望远镜包括欧洲太空总署的赫歇尔(Herschel)太空望远镜、智利的大型毫米波/亚毫米波阵列(ALMA)望远镜、中国贵州500米口径球面射电望远镜(FAST)、上海天文台天马(65米口径)望远镜、新疆天文台未来的QTT(110米口径)全向可动射电望远

镜，以及中国作为成员国之一的平方千米阵(SKA)巨型射电望远镜阵等。中国以及世界的天体化学领域正面临着一个蓬勃发展的“ 黄金时代 ”。天体化学模拟与物理化学实验以及多波段射电观测之间的交叉融合已经成为必然趋势。

此项研究得到中央高校基本科研业务费专项资金、中科院天文大科学研究中心高端用户专项经费、国家自然科学基金委等的资助。



IRC+10216星周分子示意图(Li et al.,A&A, 568, A111, 2014)

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发