

# مبانی شیمی اتمسفر و اخترشیمی

ترجمه‌ی مقاله: AstrochemistryLectureNotes2014

نویسنده و صاحب اثر: Claire Vallance

مترجم: کیوان صانعی

(تاریخ ترجمه: بهار ۱۴۰۲ خورشیدی)

تقدیم به:

✽ آمان که در راه آموزش دانش را همایم بودند ✽

و تقدیم به استاد گرانقدر:

✽ جناب آقای مهندس کیان کیانی ✽

سرچشمه‌های نویسنده :

1. *Astrochemistry*, by Andrew Shaw (textbook)
2. *Ion chemistry and the interstellar medium*, Theodore P. Snow and Veronica M. Bierbaum, *Ann. Rev. Anal. Chem.*, 1 229-259 (2008).
3. *Laboratory Astrochemistry: Gas-phase processes*, Ian W. M. Smith, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 49, 29-6 (2011).
4. *Frontiers of Astrochemistry*, David A. Williams, *Faraday Discuss.* 109, 1-13, (1998).
5. *Laboratory astrochemistry: studying molecules under inter- and circumstellar conditions*, D. Gerlich and M. Smith, *Physica Scripta*, 73, C25-C31 (2006).
6. *Formation of complex chemical species in astrochemistry (a review)*, V. I. Shematovich, *Solar System Research*, 46(6), 391-407 (2012).
7. *Aromatic hydrocarbons, diamonds, and fullerenes in interstellar space: puzzles to be solved by laboratory and theoretical astrochemistry*, K. Sellgren, *Spectrochimica Acta Part A*, 57, 627-642 (2001).
8. *Quantum astrochemistry: prospects and examples*, G. Berthier, F. Pauzat and Tao Yuanqi, *J. Mol. Struct.*, 107, 39-48 (1984).
9. *Molecules, ices, and astronomy*, D. A. Williams, W. A. Brown, S. D. Price, J. M. C. Rawlings, and S. Viti, *Astronomy and Geophysics*, 48, 1.25-1.34 (2007)

## فهرست

|    |       |        |   |
|----|-------|--------|---|
| ۳  | ..... | ۱      | دیباچه  |
| ۳  | ..... | ۲      | مطالعه‌ی کیهان از طریق طیف سنجی                     |
| ۴  | ..... | ۳      | جابجایی داپلری                                      |
| ۴  | ..... | ۴      | شکل خطی داپلر                                       |
| ۵  | ..... | ۵      | ثابت هابل و سن کیهان                                |
| ۵  | ..... | ۶      | سر آغاز کیهان: اجزای سازنده‌ی ماده                  |
| ۶  | ..... | ۷      | هسته‌های هیدروژن و هلیوم                            |
| ۶  | ..... | ۸      | اولین اتم‌ها  |
| ۷  | ..... | ۹      | تشکیل ستاره و سنتز هسته‌ی سنگین‌تر عناصر            |
| ۹  | ..... | ۱۰     | پراکندگی عناصر شیمیایی                              |
| ۹  | ..... | ۱۱     | فراوانی عناصر در کیهان                              |
| ۱۰ | ..... | ۱۲     | فضای میان ستاره‌ای                                  |
| ۱۱ | ..... | ۱۳     | شیمی در فضای میان ستاره‌ای                          |
| ۱۲ | ..... | ۱۴     | سنتز مولکولی در ابرهای گازی میان ستاره‌ای           |
| ۱۳ | ..... | ۱۵     | فرایندهای یونیزاسیون در فضای میان ستاره‌ای          |
| ۱۴ | ..... | ۱۶     | واکنش‌های شیمیایی فاز-گاز در فضای میان ستاره‌ای     |
| ۱۵ | ..... | ۱۶-۱   | واکنش‌های تشکیل پیوند                               |
| ۱۵ | ..... | ۱۶-۱-۱ | ترکیب تابشی   |
| ۱۵ | ..... | ۱۶-۱-۲ | ترکیب جدایی   |
| ۱۵ | ..... | ۱۶-۱-۳ | واکنش‌های غبار - دانه-کاتالیست                      |
| ۱۶ | ..... | ۱۶-۲   | واکنش‌های شکست پیوند                                |
| ۱۶ | ..... | ۱۶-۲-۱ | تجزیه در اثر نور و تجزیه در اثر برخورد              |
| ۱۶ | ..... | ۱۶-۲-۲ | نو ترکیبی تجزیه‌ای                                  |
| ۱۶ | ..... | ۱۶-۳   | واکنش‌های نوآرایی                                   |
| ۱۶ | ..... | ۱۶-۳-۱ | انتقال بار  |
| ۱۷ | ..... | ۱۶-۳-۲ | واکنش‌های خنثی                                      |
| ۱۷ | ..... | ۱۶-۳-۳ | واکنش‌های یون-مولکول                                |
| ۱۹ | ..... | ۱۷     | فرایندهای خنثی سازی در فضای میان ستاره‌ای           |
| ۱۹ | ..... | ۱۸     | یک مدل ساده برای محاسبه‌ی سرعت واکنش‌های یون-مولکول |
| ۲۳ | ..... | ۱۹     | اختر شیمی مبتنی بر آزمایشگاه                        |
| ۲۳ | ..... | ۲۰     | چالش بزرگ: مدل سازی شیمیایی ابرهای مولکولی غول آسا  |
| ۲۴ | ..... | ۲۱     | جستجو برای مولکول‌های بیولوژیکی                     |
| ۲۵ | ..... | ۲۲     | نوارهای پراکنده‌ی میان ستاره‌ای                     |
| ۲۵ | ..... | ۲۳     | مروری بر اختر شیمی                                  |

## ۱- دیباچه

در نقطه‌ای بسیار دور و ناشناخته، در انتهای نامتعارف بازوی مارپیچ غربی کهکشان، خورشید کوچک زرد و نادیده گرفته‌ای قرار دارد. که یک سیاره‌ی سبز آبی کوچک کاملاً ناچیز در فاصله تقریباً نود و هشت میلیون مایلی به دور آن می‌گردد که شکل‌های حیات از نسل میمون‌ها به قدری ابتدایی و شگفت‌آور هستند که هنوز فکر می‌کنند ساعت‌های دیجیتال ایده‌ای بسیار شیک هستند.

داگلاس آدامز، راهنمای سفر به کهکشان

تاکنون در دوره‌های تحصیلی خود، به خوبی با شیمی در کره‌ی زمین «سیاره‌ی سبز آبی» که سیاره‌ای بسیار کوچک و ناچیز در کیهان بی‌کران است آشنا شده‌اید. در این دوره، بررسی شیمی را کمی بیشتر گسترش خواهیم داد تا کیهان را از دریچه‌ی دانش شیمی بیشتر مورد بررسی قرار دهیم.

بسیاری از آنچه در مورد کیهان می‌دانیم از طریق به کارگیری اصول بنیادی از شیمی فیزیک در داده‌های به دست آمده توسط تلسکوپ‌های زمینی و فضایی آموخته شده است و ما برخی از این اصول را در ادامه‌ی این دوره مورد بررسی قرار خواهیم داد. ما مراحل اولیه‌ی کیهان و وقایعی که منجر به سنتز عناصر شیمیایی می‌شود را بررسی خواهیم کرد و در فضای میان ستاره‌ای (ISM) که دارای شیمی غنی از مولکول‌های ناشناخته‌ای است که احتمالاً نمی‌توانند در روی زمین پایدار بمانند، سفر خواهیم کرد. اما با استفاده از همان اصولی که به ما امکان می‌دهد علم شیمی زمینی را درک کنیم.

## ۲- مطالعه‌ی کیهان از طریق طیف سنجی<sup>۲</sup>

برخلاف بیشتر حوزه‌های دیگر شیمی و فیزیک، ما نمی‌توانیم هیچ آزمایش فعالی برای مطالعه‌ی شیمی کیهان انجام دهیم. در عوض، تمام اطلاعاتی که داریم از مشاهدات غیرفعال می‌آیند. داده‌های تلسکوپ‌ها به شکل خطوط طیف‌سنجی ثبت شده در بخش‌های مختلف طیف الکترومغناطیسی (مرئی-فرابنفش<sup>۳</sup>، فروسرخ<sup>۴</sup>، میکروویو<sup>۵</sup> و غیره) برای نواحی مختلف فضا (ستاره‌ها، فضای میان ستاره‌ای و غیره) به دست می‌آیند و می‌توانند ترکیب اتمی و مولکولی این نواحی را تعیین کنند. تلسکوپ‌های زمینی فقط قادر به مطالعه‌ی محدوده‌ای از طیف الکترومغناطیسی هستند که جو زمین آنها را جذب نمی‌کند. اینها شامل:

- ناحیه‌ی مرئی-فرابنفش با محدوده‌ی 300-900 nm می‌باشند که مربوط به انتقال الکترونی است.
- دو ناحیه‌ی فرو سرخ از 1-5  $\mu\text{m}$  و 8-20  $\mu\text{m}$ ، که می‌تواند برای بررسی انتقال‌های ارتعاشی استفاده شود.
- محدوده‌ای در ناحیه‌ی امواج میکروویو و میلی‌متر، 0.35-1.3 mm، که می‌تواند برای بررسی انتقال‌های چرخشی استفاده شود.
- و یک ناحیه‌ی موج رادیویی از 2-10 m که حاوی اطلاعاتی در مورد انتقال‌های بین سطوح زیر لایه‌ی اتمی است، مانند خط 21cm در هیدروژن اتمی.

تلسکوپ‌های فضایی چنین محدودیت‌هایی را ندارند و می‌توانند هر محدوده‌ای از طیف را رصد کنند. به طور کلی، محدوده‌ی میکروویو دارای بیشترین ارزش اطلاعاتی است و بنابراین برای مطالعه‌ی مولکول‌های کوچک در فضا از همه مفیدتر است و به دنبال آن محدوده‌ی فرو سرخ و مرئی-فرابنفش قرار دارند.

اتم‌ها و مولکول‌ها را می‌توان از طریق فرکانس‌های جذب یا گسیل آنها شناسایی کرد و با شدت جذب یا انتشار، کمیت آنها مشخص می‌شود. یک یا دو ویژگی اضافی برای تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی از تلسکوپ‌ها وجود دارد که با مواردی که در طیف سنجی‌های روزمره با آن مواجه می‌شوند متفاوت است. اول، بیشتر انتقال‌ها اثر جابجایی داپلر می‌باشند، و دوم، شکل خط می‌تواند اطلاعات زیادی در مورد حرکت جسم مورد مطالعه ارائه دهد.

1 Interstellar Medium

2 Spectroscopy

3 Ultraviolet-visible (UV-vis)

4 Infrared

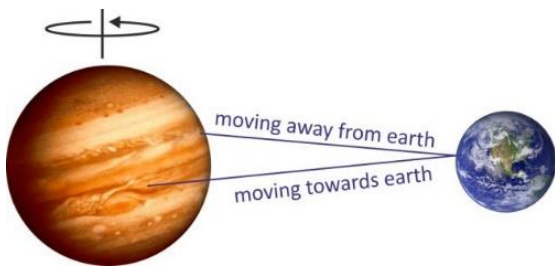
5 Microwave

## ۳- جابجایی داپلری<sup>۶</sup>

برای سرعت‌های خیلی کمتر از سرعت نور<sup>۷</sup>، طول موج مشاهده شده‌ی نور نثری یا جذبی از یک جرم در حال حرکت مقداری جابجایی داپلری دارد:

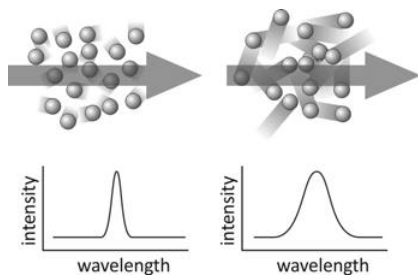
$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{v_{source}}{c} \quad \text{معادله ۱-۳}$$

که  $\lambda$  طول موج منبع در حال انتشار،  $\Delta\lambda$  مقدار جابجایی داپلر،  $v_{source}$  سرعت منبع موج نسبت به ناظر و  $c$  سرعت نور است. هنگام شناسایی خطوط طیف سنجی از داده‌های تلسکوپ، اثر داپلر باید در نظر گرفته شود. از آنجایی که کیهان در حال گسترش است، به طوری که همه‌ی اجرام نجومی دیگر از زمین دور می‌شوند، اغلب خطوط در طول موج‌هایی ظاهر می‌شوند که به طور قابل توجهی از آنچه برای یک نمونه‌ی ثابت انتظار می‌رود، به سمت قرمز تغییر می‌کنند. اگر سرعت منبع مشخص باشد، می‌توان طول موج‌ها را برای مقایسه با داده‌های طیف سنجی مبتنی بر آزمایشگاه یا محاسبه شده تصحیح کرد. اگر سرعت منبع مشخص نباشد، خطوط باید از طریق فرایند "تطبیق الگو" شناسایی شوند، و هنگامی که یک تطابق یافت می‌شود، می‌توان از آنها برای تعیین سرعت منبع استفاده کرد.



یک مثال خوب از اندازه‌گیری سرعت از طریق اثر جابجایی داپلر، تعیین سرعت چرخشی سیاره‌ی مشتری است. در طول چرخش، یک طرف سیاره (همانطور که از زمین مشاهده می‌شود) به سمت زمین حرکت می‌کند و خطوط طیفی آن به سمت آبی<sup>۸</sup> تغییر می‌کند، در حالی که طرف دیگر از زمین دور می‌شود و خطوط طیفی آن به سمت قرمز<sup>۹</sup> تغییر می‌کند. با مقایسه‌ی جابجایی داپلر خط لیمان  $\alpha$  هیدروژن از هر طرف سیاره، ما می‌توانیم سرعت چرخش و جهت آن را تعیین کنیم.

## ۴- شکل خطی داپلر<sup>۱۰</sup>



در یک نمونه به طور معمول، سرعت‌های متفاوت وجود دارد، به این معنی که هر مولکول یک مقدار کمی تغییر شیمیایی متفاوت خواهد داشت. این منجر به گسترش خط بیش و بالاتر از عرض خط طبیعی می‌شود. برای مثال: مولکول‌هایی با جرم  $m$  و توزیع سرعت ماکسول بولتزمن<sup>۱۱</sup> در دمای  $T$ ، پهنای خط داپلر برابر است با:

$$\delta\lambda = \frac{2\lambda}{c} \left( \frac{2k_B T \ln 2}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{معادله ۱-۴}$$

بنابراین می‌توان از پهنای خط داپلر برای تعیین دمای نمونه استفاده کرد.

6 Doppler shift

8 Blue-shift

9 Red-shift

10 Doppler lineshape

11 Maxwell Boltzmann velocity distribution

<sup>۷</sup> برای سرعت‌های بیشتر از حدود  $0.7c$ ، یک تصحیح نسبیتی نیاز است.



## مبانی شیمی اتمسفر و اختر شیمی

### ۵- ثابت هابل<sup>۱۲</sup> و سن کیهان

هابل جابجایی به سرخ داپلر را برای تعدادی از کهکشان‌ها اندازه گیری کرد و دریافت که وقتی جابجایی به سرخ در برابر فاصله‌ی کهکشان‌هایی که محدوده‌ای از فواصل از زمین را در بر می‌گیرند ترسیم می‌شود، این طرح یک خط مستقیم را نشان می‌دهد. این نتیجه در قانون هابل خلاصه شده است:

$$v = Hd \quad \text{معادله ۵-۱}$$

که  $v$  سرعت شعاعی،  $H$  ثابت هابل و  $d$  فاصله است. این معادله، سرعت رکود سایر کهکشان‌ها و در نتیجه سرعت گسترش کیهان را بطور خلاصه بیان می‌کند. جدیدترین مقدار ثابت هابل مقدار  $23 \text{ km s}^{-1} \text{ Mly}^{-1}$  با خطای حدود 10% تعیین شده است. تخمین‌های دیگر مقداری بین 19 و  $21 \text{ km s}^{-1} \text{ Mly}^{-1}$  را ارائه می‌دهند. اگر فرض کنیم که سرعت گسترش کیهان ثابت مانده است (این به طور بالقوه می‌تواند یک فرض بزرگ باشد)، آنگاه سن کیهان صرفاً معکوس ثابت هابل است و سن 13.8 میلیارد سال را نشان می‌دهد.

بنابراین سوال این است که؛ آغاز و پیدایش شیمی چگونه در 13.8 میلیارد سال پیش اتفاق افتاده است؟

### ۶- سر آغاز کیهان: اجزای سازنده‌ی ماده

شیمی، مانند همه چیز در کیهان، با مه بانگ<sup>۱۳</sup> آغاز شد. بلافاصله پس از مه بانگ، در آنچه به عنوان دوره‌ی تورم شناخته می‌شود، کیهان تحت گسترش نمایی بسیار سریع قرار گرفت و حجم آن حداقل  $10^{78}$  مرتبه افزایش یافت و از ابعاد زیر اتمی به اندازه یک گریپ‌فروت منبسط شد. دوره‌ی تورمی تا حدود  $10^{-32}$  ثانیه پس از مه بانگ ادامه داشت، و این اولین "زمان پس از مه بانگ" معنی دار است. دما و فشار در این مدت هر دو به طور غیرقابل تصویری بالا بود و از این نقطه به بعد کیهان به گسترش<sup>۱۴</sup> (غیر نمایی) و سرد شدن به طور سریع ادامه داد.

بلافاصله پس از دوره‌ی تورم، کیهان به اندازه کافی سرد شده بود تا اولین ذرات تشکیل شوند. این ذرات از انرژی خالص تشکیل شدند. انیشتین اولین بار در معادله‌ی معروف خود،  $E=mc^2$ ، هم ارزی و قابلیت تبدیل ماده و انرژی را نشان داد. برای فهم این معادله متوجه می‌شوید که ۱ گرم جرم می‌تواند انرژی معادل ۸۹ تراژول ( $8.9 \times 10^{13} \text{ J}$ ) ایجاد کند که مقدار انرژی تقریباً غیرقابل درک است. با این حال، ذرات بنیادی تنها کسر کوچکی از گرم وزن دارند و انرژی معادل آنها، که انرژی استراحت (پایدار) آنها نامیده می‌شود، بر حسب MeV اندازه‌گیری می‌شود.

( تعریف مگا الکترون ولت برابر است با:  $1 \text{ MeV} = 1.602 \times 10^{-13} \text{ J}$  )

بقیه انرژی‌های الکترون‌ها، پروتون‌ها و نوترون‌ها، سه ذره که با آنها آشنا هستید، به ترتیب 0.511 MeV، 938 MeV و 950 MeV می‌باشند. در  $10^{-32}$  ثانیه پس از مه بانگ، ذرات بنیادی شروع به تشکیل شدن کردند. اینها شامل کوارک‌ها، گلوئون‌ها، الکترون‌ها و نوترینوها<sup>۱۵</sup> بودند. با این حال، با دمای  $10^{27} \text{ K}$  بی‌اندازه داغ، تشکیل ذرات ترکیبی مانند پروتون و نوترون<sup>۱۶</sup> غیرممکن بود. در این مرحله، کیهان از یک فاز منحصر به فرد ماده به نام پلاسمای کوارک-گلوئون<sup>۱۷</sup> تشکیل شده بود.

12 The Hubble constant

13 Big Bang

۱۴ وقتی به مه بانگ (آوای بلند) فکر می‌کنیم، اکثر مردم تصور می‌کنند که ماده در حال گسترش از یک نقطه در همه‌ی جهات در یک فضای بی‌کران است. اگرچه این یک تصویر ذهنی مناسب است، اما در واقع صحیح نیست، زیرا این خود فضا است که در حال گسترش است، نه ماده در فضا. یک قیاس دو بعدی این است که تصور کنیم روی سطح (دو بعدی) یک بالن در حال باد شدن زندگی می‌کنیم. تنها جهت‌هایی که می‌دانید چپ، راست، جلو و عقب است (بالا و پایین در یک سطح دو بعدی بی‌معنی است). با گذشت زمان، مشاهده می‌کنید که اجسام در حال استراحت نسبت به سطح بالن در واقع از یکدیگر جدا می‌شوند. این درحالی است که شما کل دنیای دو بعدی خود را کاوش کرده‌اید و هیچ لبه یا "بیرون" برای گسترش آن پیدا نکرده‌اید. به طور مشابه، ما توجه می‌کنیم که به نظر می‌رسد کهکشان‌های دیگر در حال دور شدن از کهکشان ما هستند. با این حال، کهکشان‌ها واقعاً در فضا دور از ما حرکت نمی‌کنند، مانند قطعاتی از یک بمب انفجار بزرگ. در عوض، فضای بین کهکشان‌ها و ما در حال گسترش است، و این گسترش به طور همزمان در هر موقعیتی در کیهان اتفاق می‌افتد. این مقایسه از یک مقاله بسیار خوب با نام "تصورات غلط در مورد مه بانگ" (Misconceptions about the big bang) از the March 2005 edition of Scientific American گرفته شده است که به صورت آنلاین برای خوانندگان علاقه مند در دسترس است. [http://space.mit.edu/~kcooksey/teaching/AY5/MisconceptionsabouttheBigBang\\_ScientificAmerican.pdf](http://space.mit.edu/~kcooksey/teaching/AY5/MisconceptionsabouttheBigBang_ScientificAmerican.pdf)

توجه داشته باشید از آنجایی که کل انرژی در کیهان ثابت است، با گسترش کیهان، حجم کیهان افزایش می‌یابد و در نتیجه، چگالی انرژی و در نتیجه دما باید کاهش یابد.

15 Quarks, Gluons, Electrons, and Neutrinos

16 Protons and Neutrons

۱۷ فیزیکدانان تلاش زیادی برای بازآفرینی این حالت به خصوص جذب ماده انجام می‌دهند، که در آن برهمکنش قوی غلبه می‌شود و کوارک‌ها و گلوئون‌های آزاد مشاهده می‌شوند. تا آنجا که ما می‌دانیم، همیشه فقط این حالت ماده بوده است.

## مبانی شیمی اتمسفر و اختر شیمی

حدود ۱ میکروثانیه ( $10^{-6}$  s) پس از مه بانگ، دما به حدود  $10^{13}$  K کاهش یافته بود، دمایی که به اندازه‌ی کافی پایین بود که کوارک‌ها می‌توانستند برای تشکیل پروتون و نوترون ترکیب شوند.

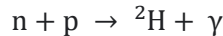
شش نوع مختلف کوارک وجود دارد (بالا "up"، پایین "down"، سر "top"، ته "bottom"، افسون "charm"، شگفت "strange")، اما فقط کوارک‌های بالا و پایین در تشکیل پروتون‌ها و نوترون‌ها نقش دارند. یک پروتون از دو کوارک بالا و یک کوارک پایین تشکیل می‌شود، درحالی‌که یک نوترون حاوی دو کوارک پایین و یک کوارک بالا است. کوارک‌های بالا و پایین به ترتیب دارای بارهای  $+2/3$  و  $-1/3$  هستند که به پروتون‌ها و نوترون‌ها بار کلی  $+1$  و  $0$  می‌دهند. کوارک‌ها همچنین دارای یک عدد کوانتومی به نام «بار رنگ»<sup>۱۸</sup> هستند که می‌تواند مقادیر «قرمز»، «سبز» یا «آبی» را بگیرد.

درحالی‌که بار تعیین می‌کند که ذرات چگونه از طریق برهم‌کنش الکترومغناطیسی با هم واکنش می‌دهند، بار رنگ برای توضیح نحوه‌ی برهم‌کنش ذرات از طریق برهم‌کنش قوی لازم است. به ویژه، برای برقراری اصل پائولی مبنی بر اینکه هیچ دو ذره‌ی یکسان در یک سیستم نمی‌توانند مجموعه‌ای از اعداد کوانتومی یکسانی داشته باشند، پروتون‌ها و نوترون‌ها باید دارای یک کوارک از هر رنگ باشند. این موضوع همچنین این اصل را برآورده می‌کند که هادرون‌ها<sup>۱۹</sup> (ذرات مرکب از کوارک‌ها) باید بی‌رنگ باشند (قرمز+سبز+آبی=بی رنگ).

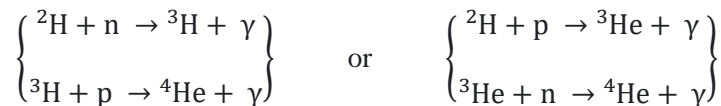
در این مرحله، یک میکروثانیه پس از مه بانگ، ما الکترون‌ها، پروتون‌ها و نوترون‌ها را تشکیل داده‌ایم و همه‌ی اجزای سازنده‌ی ماده را داریم.

### ۷- هسته‌های هیدروژن و هلیوم

حدود ۱۰۰ ثانیه پس از مه بانگ، در دمای حدود ۱ میلیارد کلون، کیهان به اندازه‌ی کافی برای تشکیل اولین هسته‌های اتمی مرکب، سرد شده بود (توجه داشته باشید که ما قبلاً هسته‌های H با تشکیل پروتون‌ها را داشتیم). پروتون‌ها و نوترون‌ها واکنش نشان دادند و هسته‌های دوتریوم<sup>۲۰</sup> را تشکیل دادند.



که  $\gamma$  یک فوتون با انرژی بالا (ذره‌ی گاما) است. هنگامی که هسته‌ی دوتریوم داریم، مسیرهای مختلفی برای رسیدن به  ${}^3\text{He}$  و  ${}^4\text{He}$  وجود دارد.



### ۸- اولین اتم‌ها

ما در کمتر از دو دقیقه از هیچ به اولین هسته‌ی اتمی رسیده‌ایم. از اینجا به بعد، کیهان یک دوره‌ی آرام را پشت سر گذاشت، بدون اینکه هیچ چیز قابل توجهی برای صدها هزار سال اتفاق بیفتد. در طول این مدت، کیهان بیشتر از یک مه داغ سفید و مات از پلاسمای هیدروژن تشکیل شده بود که با گسترش به آرامی سرد می‌شد.

پس از حدود ۳۷۰۰۰۰ سال، دما به  $10000$  K کاهش یافت، به اندازه‌ی کافی "خنک" که هسته‌های هیدروژن و هلیوم می‌توانستند الکترون‌ها را جذب کنند و اولین اتم‌های خنثی را تشکیل دهند. این اتم‌ها دیگر نمی‌توانستند تشعشعات حرارتی را جذب کنند و کیهان شفاف شد. فوتون‌هایی که در آن زمان در کیهان وجود داشتند به تدریج انرژی خود را از دست دادند و با ادامه‌ی گسترش و سرد شدن کیهان پراکنده‌تر شدند، اما هنوز هم امروزه در همه‌ی جای کیهان به عنوان "تابش پس زمینه‌ی مایکروویو کیهانی"<sup>۲۱</sup> وجود دارند. این تابش اولین بار در سال ۱۹۶۴ توسط آرنو پنزیاس و رابرت ویلسون، دو ستاره‌شناس رادیویی آمریکایی که در سال ۱۹۷۸ جایزه نوبل را برای کار خود دریافت کردند، مشاهده شد. تابش به شکل طیف از یک جسم سیاه با دمای  $2.725$  K دریافت شد.

18 Colour charge

19 Hadrons

20 Deuterium ( ${}^2\text{H}$ )

21 Cosmic microwave background radiation

تابش پس زمینه‌ی مایکروویو کیهانی بلافاصله پس از مه بانگ در طبیعت وجود داشت. با این حال، به نظر می‌رسد که می‌توان آن را در آزمایش‌های برخورد با انرژی بالا، مانند آزمایش‌هایی که در برخورد دهنده‌ی بزرگ Hadron Collider در CERN انجام شد، بازسازی کرد.

## مبانی شیمی اتمسفر و اختر شیمی

تا این لحظه به نظر می‌رسد که کیهان ما به خوبی در حال گسترش است. با این حال، ما اکنون با یک مشکل واقعی روبرو هستیم، زیرا هیچ هسته‌ی پایدار دیگری وجود ندارد که بتوان با گرفتن نوترون ایجاد کرد و برای سنتز عناصر بیشتر به ستاره‌ها نیاز داریم.

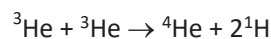
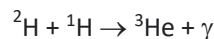
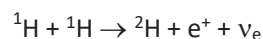
### ۹- تشکیل ستاره و سنتز هسته‌ی سنگین‌تر عناصر

با ادامه‌ی سرد شدن کیهان، هیدروژن و هلیوم بیشتری تشکیل شد. زمانی که تا حدود 500 K سرد شد، چیزی بین ۲۰۰ میلیون تا ۱ میلیارد سال پس از مه بانگ، هیدروژن و هلیوم تحت نیروی گرانش به ابرهای گازی غول‌آسا تبدیل شدند.<sup>۲۲</sup> هنگامی که ابرهای گازی به اندازه کافی بزرگ شدند (هزار تا ده‌ها هزار برابر جرم خورشیدی)، تحت تأثیر گرانش شروع به فروپاشی کردند. انرژی پتانسیل گرانشی به انرژی جنبشی تبدیل شد و با افزایش سرعت ذرات، دمای آنها نیز افزایش یافت. در مراحل اولیه‌ی شکل‌گیری ستاره، انرژی می‌تواند از ذرات گاز با انتشار تشعشعات فرسوخ از بین برود. با این حال، در نقطه‌ای چگالی گاز تا جایی افزایش می‌یابد که گاز در برابر تشعشع مات می‌شود و دما افزایش می‌یابد، ابتدا تا جایی که اتم‌های هیدروژن یونیزه می‌شوند و در نهایت به دمایی می‌رسد که در آن برخورد بین پروتون‌های حاصل انرژی کافی داشته باشد. برای القای هم‌جوشی هسته‌ای ستاره شروع به درخشش می‌کند. دو نمونه از نواحی ستاره ساز یا "مهد کودک‌های ستاره‌ای" در داخل ابرهای گازی بزرگ در تصویر زیر نشان داده شده است.

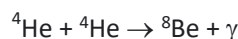


اولین ستارگان، معروف به ستارگان جمعیت III، غول‌آسا بودند، صدها برابر سنگین‌تر از خورشید، و نسبتاً سریع (در مقایسه با ستارگان بعدی) و در مقیاس زمانی سه تا چهار میلیون سال سوختند.<sup>۲۳</sup> در بیشتر عمرشان سوخت آنها به طور عمده از سوختن هیدروژن تأمین می‌شد، فرایندی چند مرحله‌ای که در آن چهار هسته‌ی  $^1\text{H}$  برای تشکیل یک هسته‌ی منفرد  $^4\text{He}$  و ذرات بنیادی مختلف دیگر با هم جوش می‌خورند.

دو مکانیسم مختلف برای سوختن هیدروژن وجود دارد، اما در ستارگان جوان (از جمله خورشید) چرخه پروتون-پروتون غالب است و حدود ۹۰٪ انرژی ستاره را تولید می‌کند.



هنگامی که ذخایر  $^1\text{H}$  در هسته‌ی یک ستاره تمام شد، نزدیک به پایان عمر آن، فرایند غالب، تبدیل هلیوم به برلیوم می‌باشد که از هم‌جوشی دو هسته‌ی  $^4\text{He}$ ، یک هسته‌ی  $^8\text{Be}$  تشکیل می‌شود.



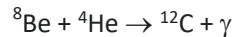
<sup>۲۲</sup> تصور می‌شود که هیدروژن مولکولی نیز در این مرحله از طریق واکنش‌های فاز-گاز تشکیل شده است، و حضور  $\text{H}_2$  در هدایت فروپاشی گرانشی که منجر به تشکیل اولین ستاره‌ها شد، مهم بود. امروز در کیهان، شکل‌گیری  $\text{H}_2$  تحت تأثیر واکنش‌های شیمیایی است که روی سطح دانه‌های غبار بین ستاره‌ای رخ می‌دهد و فرآیندهای فاز-گاز تنها سهم بسیار کمی دارند.

<sup>۲۳</sup> تا حدودی برخلاف تصور، ستارگان پرچرم‌تر عمر کوتاه‌تری دارند. اگرچه مقدار سوخت یک ستاره با جرم افزایش می‌یابد، اما سرعت مصرف این سوخت با جرم حتی سریع‌تر افزایش می‌یابد. مشخص شد که طول عمر یک ستاره در دنباله‌ی اصلی (دوره‌ی زمانی که هیدروژن به عنوان سوخت می‌سوزد) با  $1/m^3$  متناسب است.

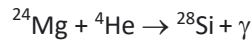
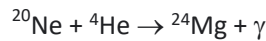
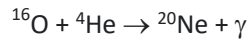
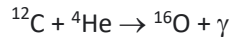


## مبانی شیمی اتمسفر و اختر شیمی

هسته  $^8\text{Be}$  حاصل از این فرایند پایدار نیست و معمولاً به دو هسته  $^4\text{He}$  تجزیه می‌شود، اما می‌تواند واکنش‌های دیگری نیز انجام دهد. برای مثال:



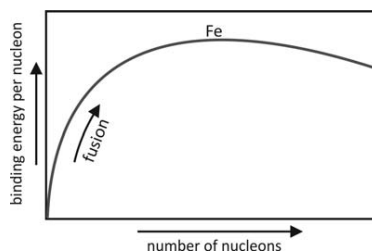
از  $^{12}\text{C}$ ، می‌توان از طریق فرایند هم‌جوشی هسته‌ای مشابه، تمام عناصر با شماره‌ی زوج را به  $^{56}\text{Fe}$  رساند.



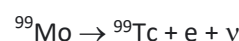
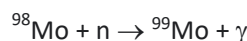
و به همین ترتیب.

هسته‌های با شماره‌های فرد در واکنش‌های کم بازده شامل جذب پروتون تشکیل می‌شوند. بسیاری از ستارگان اصلی جمعیت III احتمالاً قبل از رسیدن به پایان عمر خود از سوختن هلیوم فراتر نرفتند. در این مرحله آنها در ابرنواخترها منفجر شدند و عناصری را که تشکیل داده بودند در فضا پراکنده کردند. تا آنجا که می‌دانیم، هم‌اکنون هیچ ستاره‌ی جمعیت III وجود ندارد. با گذشت زمان، چرخه‌ی تشکیل ابرهای گازی و ویژگی‌های خنک‌کنندگی و انقباض آنها را تغییر داد، و در نتیجه ستاره‌های جمعیت II کوچک‌تر از نسل اول ستاره‌ها هستند و طول عمر بسیار بیشتری دارند. بسیاری از ستارگان جمعیت II هنوز وجود دارند و تصور می‌شود بین ۱۰ تا ۱۳ میلیارد سال سن داشته باشند (برای مقایسه، به یاد داشته باشید که تصور می‌شود کیهان حدود ۱۳.۸ میلیارد سال است). این ستارگان دارای کسر بسیار بالاتری از هسته‌های «سنگین» (یعنی غیرهیدروژن و هلیوم) نسبت به ستارگان جمعیت III هستند. برای برخی از ستارگان جمعیت II که به پایان عمر خود رسیده‌اند، چرخه‌ی تشکیل ستاره تکرار شده است تا ستارگان جمعیت I را با سن کمتر از ۱۰ میلیارد سال تشکیل دهد. که حاوی سطوح بالاتری از هسته‌های سنگین هستند، که توسط ستاره‌های جمعیت II (والد) تشکیل شده‌اند.

خورشید یک ستاره‌ی جمعیت I است. برای در نظر گرفتن همه چیز، حتی در ستاره‌های به اصطلاح «فلزینگی بالا»  $^{24}\text{Mg}$  مانند خورشید، تنها حدود ۱.۸٪ از هسته‌ی خورشید، عناصر سنگین هستند. فرایندهای هم‌جوشی هسته‌ای از نوع توصیف شده در بالا از نظر انرژی، تا زمانی که به هسته‌ی  $^{56}\text{Fe}$  برسیم پایدار هستند. همانطور که در نمودار زیر نشان داده شده است، آهن از نظر انرژی پیوند بر هسته دارای پایدارترین هسته است.



فراتر از  $^{56}\text{Fe}$ ، فرایندهای هم‌جوشی دیگر از نظر انرژی پایدار نیستند و عناصر سنگین‌تر به تدریج از طریق ترکیبی از جذب نوترون و واپاشی  $\beta$  (گسیل الکترون) ساخته می‌شوند. در مثال زیر،  $^{98}\text{Mo}$  (با عدد اتمی ۴۲) یک نوترون را جذب می‌کند تا  $^{99}\text{Mo}$  را تشکیل دهد، که سپس یک الکترون برای تشکیل  $^{99}\text{Tc}$ ، با عدد اتمی ۴۳، و یک نوترینو ساطع می‌کند. به دنبال گرفتن نوترون، انتشار الکترون است. بنابراین اثر نهایی افزایش عدد اتمی به اندازه یک واحد است.



### ۱۰- پراکندگی عناصر شیمیایی

پراکندگی عناصر شیمیایی از ستاره‌ها تا فضای میان ستاره‌ای در پایان عمر یک ستاره اتفاق می‌افتد. مکانیسم این پراکندگی به جرم ستاره بستگی دارد.

در طول زمانی که یک ستاره بیشتر با سوختن هیدروژن انرژی تولید می‌کند، به عنوان ستاره‌ی رشته‌ی اصلی شناخته می‌شود. برای ستاره‌ای از نظر اندازه شبیه به خورشید، این دوره حدود ۱۰ میلیارد سال طول می‌کشد. هنگامی که تمام هیدروژن موجود در هسته به هلیوم تبدیل شد، واکنش‌های هم‌جوشی هیدروژن در هسته متوقف می‌شود. اگرچه، این واکنش‌ها در پوسته‌ی اطراف هسته ادامه می‌یابند. هسته شروع به سرد شدن می‌کند و تحت نیروی گرانش فشرده می‌شود. در ادامه، از فرایندهای مشابه شکل‌گیری یک ستاره‌ی اصلی، هسته‌ی ستاره متراکم شده و درجه حرارت آن به حدی افزایش می‌یابد که چگالی و دما به اندازه کافی برای شروع سوزاندن هلیوم بالا می‌رود. لایه‌های بیرونی ستاره شروع به سرد شدن، گسترش و درخشش کمتری می‌کنند و ستاره هم‌اکنون یک غول قرمز<sup>۲۵</sup> شده‌است. سرانجام هلیوم درون هسته‌ی ستاره به کربن تبدیل می‌شود، در این مرحله هسته به یک کوتوله‌ی سفید<sup>۲۶</sup> تبدیل می‌شود و لایه‌های بیرونی ستاره دور می‌شوند و پوسته‌ای گازی به نام سحابی سیاره‌ای<sup>۲۷</sup> را تشکیل می‌دهند. گونه‌های اتمی داخل سحابی سیاره‌ای در نهایت در فضای میان ستاره‌ای منتشر خواهند شد. هنگامی که واکنش‌های هم‌جوشی هسته‌ای به طور کامل متوقف می‌شود، هسته‌ی ستاره‌ی مرده به عنوان کوتوله‌ی سیاه<sup>۲۸</sup> شناخته می‌شود.

توالی رویدادها برای ستارگان پرجرم (۳ تا ۵۰ برابر سنگین‌تر از خورشید) متفاوت است. طول عمر توالی اصلی آنها بسیار کوتاه‌تر است، (میلیون‌ها سال به جای میلیارد‌ها سال). هنگامی که یک ستاره‌ی پرجرم ذخایر هیدروژن خود را تمام کرد و شروع به سوزاندن هلیوم کرد، بسیار بیشتر از یک ستاره‌ی کم جرم منبسط می‌شود و یک ابرغول سرخ<sup>۲۹</sup> را تشکیل می‌دهد. در طی میلیون سال بعدی، بسیاری از واکنش‌های هسته‌ای مختلف در هسته رخ می‌دهند و عناصر مختلفی را در پوسته‌های اطراف یک هسته‌ی آهنی تشکیل می‌دهند. در نهایت، سوخت ستاره تمام می‌شود و منجر به یک فروپاشی گرانشی جذاب و غیرعادی می‌شود و انفجار بعدی ابرنواختر<sup>۳۰</sup> نام دارد. برخلاف میلیون‌ها سال که ستاره تا این لحظه تکامل یافته است، رویداد ابرنواختر کمتر از یک ثانیه طول می‌کشد. موج ضربه‌ای حاصل از لایه‌های بیرونی ستاره در فضای میان ستاره‌ای منفجر می‌شود، اما گاهی اوقات هسته از انفجار جان سالم به در می‌برد. اگر هسته‌ی باقیمانده جرمی بین ۱.۵ تا ۳ برابر جرم خورشید داشته باشد، منقبض می‌شود و یک ستاره‌ی نوترونی<sup>۳۱</sup> بسیار متراکم تشکیل می‌دهد، درحالی‌که یک هسته با جرم بالاتر منقبض می‌شود و سیاه چاله<sup>۳۲</sup> را تشکیل می‌دهد.

### ۱۱- فراوانی عناصر در کیهان

همه‌ی عناصر شیمیایی موجود در کیهان امروزی از طریق فرایندهایی از نوع توصیف شده در بالا شکل می‌گیرند. فراوانی هر عنصر در کیهان در زیر رسم شده است (توجه کنید مقیاس لگاریتمی است) که برخی از ویژگی‌های جالب را نشان می‌دهد.

(۱) کیهان از حدود ۷۴ درصد هیدروژن، ۲۴ درصد هلیوم و تنها ۲ درصد از عناصر سنگین‌تر تشکیل شده است.

(۲) فراوانی از عناصر سبک به عناصر سنگین کاهش پیدا می‌کند.

(۳) آهن پایدارترین هسته را دارد و در نتیجه یکی از فراوان‌ترین عناصر است.

(۴) لیتیم، بریلیم و بور در مقایسه با سایر عناصر بسیار کمیاب هستند، زیرا هیچ راه ساده‌ای برای ساخت آنها از طریق واکنش‌های هسته وجود ندارد.

(۵) عناصر زوج فراوان‌تر از فرد هستند زیرا هسته‌ی آنها پایدارتر است و به طور مؤثری بیشتر تشکیل می‌شوند.

25 Red giant

26 White dwarf

27 Planetary nebula

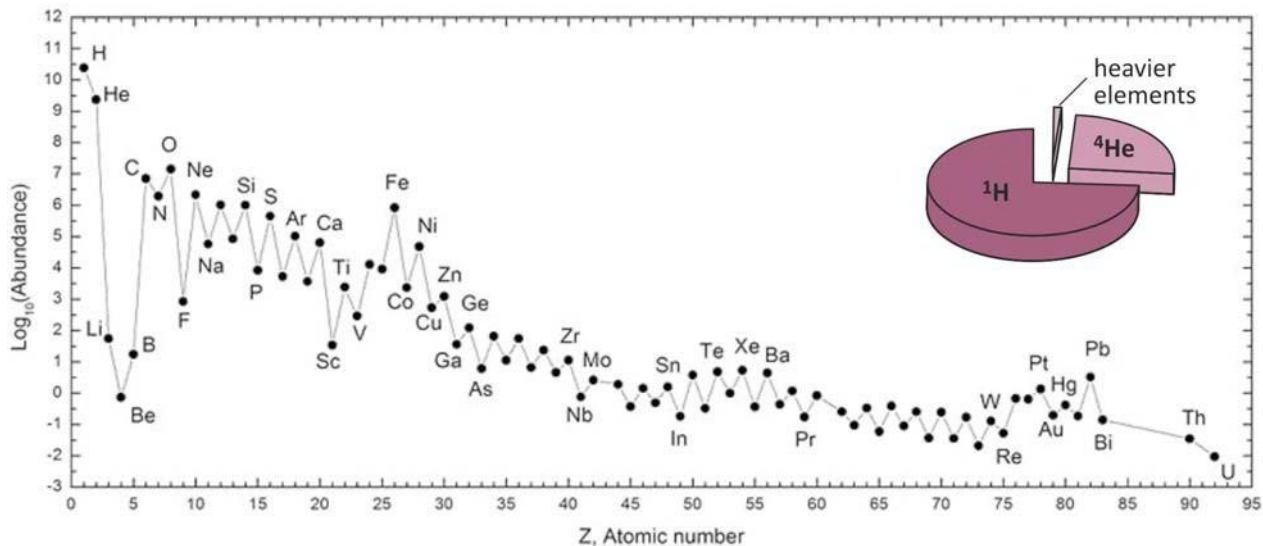
28 Black dwarf

29 Red supergiant

30 Supernova

31 Neutron star

32 Black hole



### ۱۲- فضای میان ستاره‌ای<sup>۳۳</sup>

اکنون که مدتی را صرف بررسی سنتز عناصر شیمیایی درون ستارگان کرده‌ایم، توجه خود را به فضای میان ستاره‌ای معطوف می‌کنیم. اصطلاح «میان ستاره‌ای» تعدادی از فضاها را پوشش می‌دهد که در زیر فهرست شده‌اند.

(۱) فضای پراکنده میان ستاره‌ای<sup>۳۴</sup>: این نواحی به طور مؤثر "فضای خالی" هستند. چگالی ذرات در حدود 1 to 100  $\text{cm}^{-3}$  است، و درحالی که دمای انتقال اتم‌ها و مولکول‌ها ممکن است تا 100 K باشد، مفهوم دما واقعاً در چنین چگالی‌های عددی کم، کاربردی نیست. این نواحی از فضای میان ستاره‌ای بیشتر حاوی هیدروژن اتمی و یون‌های اتمی، با کسر مولکولی کوچک (تعریف شده با نسبت  $\text{H}_2$  به H) بین 0.0 و 0.1 می‌باشند.

(۲) ابره‌های مولکولی غول‌آسا<sup>۳۵</sup>: اینها مجموعه‌ی عظیمی از گازها هستند که می‌توانند ده‌ها سال نوری قطر داشته باشند و بیشترین جرم موجود در فضای میان ستاره‌ای را در خود جای دهند. آنها همچنین مناطق تشکیل ستاره‌ی جدید هستند. چگالی متوسط در یک ابر مولکولی غول‌آسا حدود  $100\text{-}1000 \text{ cm}^{-3}$  است، اما متراکم‌ترین مناطق ممکن است تا  $10^6 \text{ cm}^{-3}$  چگالی داشته باشند. محدوده‌ی دمایی از حدود 100 K در نزدیکی لبه‌های ابر تا حدود 10 K در مرکز متغیر است. همانطور که از نام آن پیداست، ابرهای مولکولی غول‌آسا دارای مقدار قابل توجهی از جرم‌های شیمیایی هستند و شامل بسیاری از گونه‌های مولکولی مختلف هستند (بیش از ۱۶۰ مورد در آخرین شمارش - جدول زیر را ببینید). با این حال، باید توجه داشت که چگالی متوسط درون چنین ابری با بهترین خلاء قابل دستیابی روی زمین قابل مقایسه است. گاهی اوقات ابرهای مولکولی به زیر دسته‌های زیر طبقه‌بندی می‌شوند:

- ابره‌های مولکولی پراکنده<sup>۳۶</sup>: بیشتر ماده به جای شکل مولکولی به صورت اتمی وجود دارد. کسر مولکولی (نسبت تعداد مولکول‌های  $\text{H}_2$  به تعداد کل اتم‌های H) بین 0.1 و 0.5 قرار دارد.
- ابره‌های مولکولی شفاف<sup>۳۷</sup>: بیشتر H به شکل مولکولی وجود دارد، اما بیشتر کربن به شکل اتمی C یا  $\text{C}^+$  وجود دارد و مقداری نیز به شکل مولکولی و بیشتر به صورت CO وجود دارد.
- ابره‌های مولکولی چگال<sup>۳۸</sup>: تقریباً تمام H به صورت  $\text{H}_2$  وجود دارد و بیشتر کربن نیز به شکل مولکولی وجود دارد. ابرهای متراکم بیشتر از  $\text{H}_2$  تشکیل شده‌اند که CO فراوان‌ترین مولکول بعدی است (حدود  $10^{-4}$  برابر عدد چگالی  $\text{H}_2$ ). مولکول‌های ساده‌ی دیگر مانند CH، OH، CN، و  $\text{H}_2\text{O}$  با تراکم تعداد بسیار کمتری وجود دارند که در مجموع حدود  $10^{-7}$  برابر چگالی  $\text{H}_2$  را تشکیل می‌دهند.

33 The interstellar medium

34 Diffuse interstellar medium

35 Diffuse interstellar medium

36 Diffuse molecular clouds

37 Diffuse molecular clouds

38 Dense molecular clouds

## (۳) فضای ستاره‌ای ۳۹:

اینها مناطقی هستند که بی‌واسطه در اطراف یک ستاره قرار دارند و فضای درون این مناطق به نوع و میزان تکامل ستاره بستگی دارد. نواحی اطراف ستارگان جوان شار فوتونی بالایی را در پرتو فرابنفش تجربه می‌کنند، به طوری که همه‌ی مولکول‌ها از هم جدا می‌شوند و فوتونیزه می‌شوند (این مناطق گاهی اوقات به عنوان مناطق تحت سلطه‌ی فوتون شناخته می‌شوند). در اطراف ستارگان پیرتر ممکن است غبار قابل توجهی وجود داشته باشد که منجر به شیمی سطح<sup>۴۰</sup> و همچنین پراکندگی نور ستاره شود.

ما توجه خود را بر روی ابرهای مولکولی غول آسا متمرکز خواهیم کرد. ترکیب اتمی این مناطق با تاریخ گذشته‌ی ستارگان نزدیک تعیین می‌شود (به بخش‌های ۹ و ۱۰ مراجعه کنید)، که مواد هسته‌ای پردازش شده را از طریق بادهای ستاره‌ای و انفجارهای ابرنواختری به بیرون پرتاب می‌کنند. همانطور که خواهیم دید، ترکیب مولکولی انعکاسی از تعادل بین تکامل شیمیایی از طریق واکنش‌ها، تخریب مولکول‌ها به وسیله‌ی نور حاصل از ستاره‌ها یا پرتوهای کیهانی، و چگالش و واکنش بعدی روی دانه‌های غبار می‌باشند.

جدول ۱ - مولکول‌های شناسایی شده در فضا. تشخیص‌های تایید نشده با علامت ؟ نشان داده می‌شوند. برگرفته از Molecules in Space. توسط J. Tennyson، جلد ۳، قسمت ۳، فصل ۱۴ کتاب راهنمای فیزیک مولکولی و شیمی کوانتومی (جان وایلی و پسران، ۲۰۰۳)

|                      |   |
|----------------------|---|
| Diatomic molecules   | AlF, AlCl, C <sub>2</sub> , CH, CN, CO, CP, CS, CSi, HCl, H <sub>2</sub> , KCl, NH, NO, NS, NaCl, OH, PN, SO, SiN, SiO, SiS, HF, SH, SiH, CH <sup>+</sup> , CD <sup>+</sup> , CO <sup>+</sup> , SO <sup>+</sup>   |
| Triatomic molecules  | C <sub>3</sub> , C <sub>2</sub> H, C <sub>2</sub> O, C <sub>2</sub> S, CH <sub>2</sub> , HCN, HCO, H <sub>2</sub> O, H <sub>2</sub> S, HNC, HNO, MgCN, MgNC, N <sub>2</sub> O, NaCN, OCS, SO <sub>2</sub> , SiC <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> , NH <sub>2</sub> , SiCN, HCO <sup>+</sup> , DCO <sup>+</sup> , HCS <sup>+</sup> , HOC <sup>+</sup> , N <sub>2</sub> H <sup>+</sup> , H <sub>3</sub> , H <sub>2</sub> D <sup>+</sup> |
| Four-atom molecules  | C <sub>3</sub> H, C <sub>3</sub> H, C <sub>3</sub> N, C <sub>3</sub> O, C <sub>3</sub> S, C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , HCCN, HNCO, HNCS, H <sub>2</sub> CO, H <sub>2</sub> CN, H <sub>2</sub> CS, NH <sub>3</sub> , SiC <sub>3</sub> , CH <sub>3</sub> , CH <sub>2</sub> D <sup>+</sup> ?, HCNH <sup>+</sup> , HOCO <sup>+</sup> , H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>   |
| Five-atom molecules  | C <sub>5</sub> , C <sub>4</sub> H, C <sub>4</sub> Si, l-C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> , c-C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> , CH <sub>2</sub> CN, CH <sub>4</sub> , HC <sub>3</sub> N, HC <sub>2</sub> NC, HCOOH, H <sub>2</sub> CHN, H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> O, H <sub>2</sub> NCN, HNC <sub>3</sub> , SiH, H <sub>2</sub> COH <sup>+</sup>  |
| Six-atom molecules   | C <sub>5</sub> H, C <sub>5</sub> O, C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , CH <sub>3</sub> CN, CH <sub>3</sub> NC, CH <sub>3</sub> OH, CH <sub>3</sub> SH, HC <sub>3</sub> NH <sup>+</sup> , HC <sub>2</sub> CHO, HCONH <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> C <sub>4</sub> , C <sub>5</sub> N, HC <sub>3</sub> NH <sup>+</sup>   |
| Seven-atom molecules | C <sub>6</sub> H, CH <sub>2</sub> CHCN, CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H, HC <sub>5</sub> N, HCOCH <sub>3</sub> , NH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> , c-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O   |
| Eight-atom molecules | CH <sub>3</sub> C <sub>3</sub> N, HCOOCH <sub>3</sub> , CH <sub>3</sub> COOH?, CH <sub>2</sub> OHCHO, H <sub>2</sub> C <sub>6</sub> , C <sub>7</sub> H  |
| Nine-atom molecules  | CH <sub>3</sub> C <sub>4</sub> N, CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CN, (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> O, CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH, HC <sub>7</sub> N, C <sub>8</sub> H  |
| 10-atom molecules    | CH <sub>3</sub> C <sub>5</sub> N?, (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO, NH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> COOH?  |
| 11-atom molecules    | HC <sub>9</sub> N   |
| 13-atom molecules    | HC <sub>11</sub> N  |

## ۱۳- شیمی در فضای میان ستاره‌ای

ویژگی ابرهای مولکولی، دمای بسیار پایین آنهاست که حدود 10 K می‌باشد. در یک چنین دمایی انرژی لازم برای برخورد مؤثر ذرات با هم در حدی نیست که واکنش روی دهد. و تنها واکنش‌های شیمیایی فاز-گاز<sup>۴۱</sup> هستند که می‌توانند در چنین دماهای پایینی انجام شوند، واکنش‌های رادیکال-رادیکال<sup>۴۲</sup> و واکنش‌های مولکولی یون-مولکول<sup>۴۳</sup> هستند. ابرهای گازی میان ستاره‌ای نیز بر اساس استانداردهای زمینی چگالی بسیار پایینی دارند که در نتیجه‌ی این چگالی پایین احتمال برخورد ذرات با هم که منجر به واکنش شیمیایی شود بسیار پایین است. تعداد برخوردها در یک واحد حجم در هر ثانیه (فرکانس برخورد) برابر است با:

$$z = \sigma_C \left( \frac{8k_B T}{\pi \mu} \right)^{1/2} n_A n_B \quad \text{معادله ۱-۱۳}$$

که  $\sigma_C$  سطح مقطع برخورد،  $T$  دما،  $\mu$  جرم کاهش یافته و  $n_A$  و  $n_B$  تراکم تعداد گونه‌های مورد نظر حتی در متراکم‌ترین مناطق، با چگالی عددی  $10^6 \text{ cm}^{-3}$  هستند.

39 Circumstellar medium

40 Surface chemistry

41 Gas-Phase

42 Radical-Radical

43 Ion-Molecule

## مبانی شیمی اتمسفر و اختر شیمی

نرخ برخورد حدود  $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  است، تقریباً هر نیم ساعت یک برخورد. در مناطق با چگالی کمتر، اتم‌ها و مولکول‌ها ممکن است برای هفته‌ها یا حتی بیشتر فقط یک برخورد داشته باشند. بنابراین، واکنش‌های شیمیایی با سرعت بسیار پایین‌تری در فضای میان ستاره‌ای در مقایسه با مقیاس‌های زمانی که ما روی زمین به آن عادت کرده‌ایم، رخ می‌دهد. با این حال، از آنجایی که ابرهای مولکولی غول‌آسا حدود ۱۰ تا ۱۰۰ میلیون سال دوام می‌آورند قبل از اینکه توسط گرما و بادهای ستاره‌ای ناشی از ستارگان شکل گرفته در آنها پراکنده شوند، زمان زیادی برای وقوع برخی واکنش‌های شیمیایی پیچیده وجود دارد، البته با سرعتی نسبتاً آرام. فرکانس برخورد بسیار پایین پیامدهای مهمی برای انواع مولکول‌هایی دارد که ممکن است در فضای میان ستاره‌ای تشکیل شوند. همانطور که از جدول مولکول‌های بالا می‌بینیم، مفاهیم زمینی پایداری مولکولی به سادگی در این محیط بسیار غیر واکنشی کاربرد ندارند. کربن نیازی به چهار پیوند ندارد. در واقع، بسیاری از گونه‌های زیر ظرفیتی، رادیکال‌ها، یون‌های مولکولی و ایزومرهای پرانرژی<sup>۴۴</sup> در میان مولکول‌های مشاهده شده در ابرهای گازی میان ستاره‌ای وجود دارند. ترکیبات حاوی کربن به شدت غیراشباع، دارای پیوندهای دوگانه و سه گانه و زنجیرهای چند شاخه هستند. پلی‌ین‌ها<sup>۴۵</sup> معمولاً مشاهده می‌شوند، برخی با طول‌های زنجیره‌ای کاملاً بلند، برای مثال:

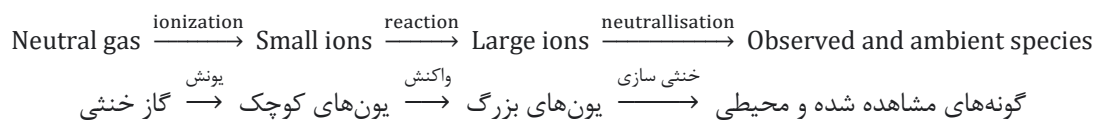


بسیاری از مولکول‌های مشاهده شده در فضا در صورت انتقال به زمین تقریباً فوری واکنش نشان می‌دهند.

همانطور که در بالا ذکر شد، برخورد بین اتم‌ها و مولکول‌ها در فضای میان ستاره‌ای بسیار به ندرت صورت می‌گیرد، و به این ترتیب، اصول شیمیایی زمینی مانند «گرماسازی<sup>۴۶</sup>» در کیهان رایج نیستند. بنابراین منطقی‌تر است که شیمی در فضای میان ستاره‌ای را به صورت برخوردهای مجزا در نظر بگیریم.

### ۱۴- سنتز مولکولی در ابرهای گازی میان ستاره‌ای

اعتقاد بر این است که سنتز مولکولی فاز-گاز در ابرهای میان ستاره‌ای بیشتر از طریق واکنش‌های یون-مولکول اتفاق می‌افتد و برخی واکنش‌های خنثی<sup>۴۷</sup> در آن نقش دارند. از آنجایی که گونه‌های مولکولی شناسایی شده از داده‌های طیف‌سنجی بیشتر خنثی هستند، گونه‌های یونی تشکیل شده در این فرایندها باید نسبتاً سریع خنثی شوند. بنابراین طرح کلی سنتز مولکولی چیزی شبیه به زیر است:



واکنش‌های شیمیایی همچنين می‌تواند روی سطح دانه‌های غبار رخ دهد. واکنش‌های کاتالیزور سطحی از این نوع در فضای بین ستاره‌ای بسیار مهم هستند و ما در ادامه با جزئیات بیشتری به آنها خواهیم پرداخت.

ما پیش از اینکه به بررسی شیمی کاتالیزوری دانه‌های غبار پردازیم، انواع واکنش‌هایی را که در هر یک از سه مرحله‌ی درگیر در شیمی میان ستاره‌ای فاز-گاز، مانند واکنش یونش و خنثی‌سازی نقش دارند، را توضیح می‌دهیم.

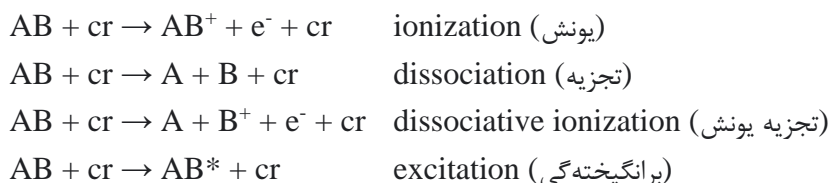


## ۱۵- فرایندهای یونیزاسیون در فضای میان ستاره‌ای

فوتویونیزاسیون، یک فرایند بسیار رایج در نزدیکی ستارگان است. با این حال، چگالی بالای هیدروژن و دانه‌های غبار در ابرهای مولکولی مانع از دیدن نور مرئی و فرابنفش از دوردست‌ها می‌شود. به همین دلیل، ابرهای مولکولی معمولاً وقتی از طریق تلسکوپ مشاهده می‌شوند تاریک به نظر می‌رسند. به عنوان مثال ابر مولکولی Barnard 68 در زیر نشان داده شده است.

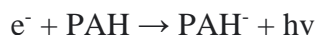


نور فرو سرخ<sup>۴۸</sup> می‌تواند به ابرهای مولکولی نفوذ کند و در واقع طیف سنجی فرو سرخ یک روش کلیدی برای شناسایی گونه‌های مولکولی در این مناطق است. با این حال، فوتون‌های فرو سرخ انرژی کافی برای یونیزه کردن مولکول‌های خنثی ندارند. در عوض، بیشتر یون‌های درون ابرهای مولکولی از برخورد با پرتوهای کیهانی تشکیل می‌شوند. پرتوهای کیهانی ذراتی با انرژی جنبشی بسیار بالا هستند که از ستارگان ساطع می‌شوند و شامل حدود 84% پروتون، 14% ذرات آلفا و 2% الکترون، هسته‌های سنگین‌تر و ذرات مرموز (ناشناخته) هستند. فرایندهای شیمیایی متعددی می‌تواند از برخورد یک مولکول با یک پرتو کیهانی<sup>۴۹</sup> حاصل شود که در زیر خلاصه می‌شود.



البته انرژی در تمام این برخوردها حفظ می‌شود. پرتوهای کیهانی که در سمت راست معادلات فوق ظاهر می‌شوند، انرژی کمتری نسبت به پرتوهای سمت چپ دارند، زیرا بخشی از انرژی خود را برای هدایت فرایند شیمیایی مورد نظر صرف کرده‌اند.

الکترون‌ها معمولاً به مولکول‌های بزرگ بر پایه‌ی کربن (برای مثال PAHs)<sup>۵۰</sup> متصل می‌شوند و یک یون منفی تولید می‌کنند. گاهی اوقات اتصال الکترون تجزیه‌ای است، در این صورت نرخ می‌تواند بسیار سریع باشد، با نرخ‌های ثابت تا  $10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . در اتصال غیر تجزیه‌ای، انتشار یک فوتون به طور کلی برای تثبیت یون مورد نیاز است. برای مثال:



48 Infrared

49 Cosmic ray (cr)

50 Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (هیدروکربن‌های آروماتیک چند حلقه‌ای)

## مبانی شیمی اتمسفر و اختر شیمی

### ۱۶- واکنش‌های شیمیایی فاز-گاز در فضای میان ستاره‌ای

طیف گسترده‌ای از مکانیزم‌های واکنش‌های شیمیایی، در فضای میان ستاره‌ای عمل می‌کنند. این‌ها را می‌توان به شکل‌گیری پیوند، شکستن پیوند و واکنش‌های نوآرایی به شرح زیر طبقه بندی کرد<sup>۵۱</sup>:

|  |   |                        |
|--|---|------------------------|
| $A + B \rightarrow AB + hv$            | ترکیب تابشی (خنثی یا یونی)              | واکنش‌های تشکیل پیوند: |
| $A^- + B \rightarrow AB + e^-$         | ترکیب جانیشینی ساده                     |                        |
| $A + B + grain \rightarrow AB + grain$ | واکنش‌های کاتالیزری غبار (خنثی یا یونی) |                        |
| $AB + hv \rightarrow A + B$            | تجزیه‌ی نوری (خنثی یا یونی)             | واکنش‌های شکستن پیوند: |
| $AB + M \rightarrow A + B + M$         | تجزیه‌ی برخوردی (خنثی یا یونی)          |                        |
| $AB^+ + e^- \rightarrow A + B$         | تجزیه‌ی ترکیب                           |                        |
| $AB^+ + e^- \rightarrow A + B$         | واکنش یون-مولکول                        | واکنش‌های نوآرایی:     |
| $A^+ + B \rightarrow A + B^+$          | انتقال بار                              |                        |
| $A + BC \rightarrow AB + C$            | واکنش خنثی (جانیشینی ساده)              |                        |

به غیر از تجزیه نوری<sup>۵۲</sup>، این فرایندها همه دو مولکولی هستند، و معمولاً انتشار با نرخ‌های ثابت حدود  $10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  کنترل می‌شود.

در ادامه انواع مختلفی از واکنش‌ها با جزئیات بیشتر و با مثال مورد بررسی قرار خواهند گرفت.

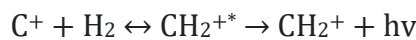
|                              |  |   |
|------------------------------|--|---|
| 51 Bond formation reactions: | Radiative association (neutral or ionic)<br>Associative detachment<br>Dust-grain-catalysed reaction (neutral or ionic) | $A + B \rightarrow AB + hv$<br>$A^- + B \rightarrow AB + e^-$<br>$A + B + grain \rightarrow AB + grain$ |
| Bond breaking reactions:     | Photodissociation (neutral or ion)<br>Collisional dissociation (neutral or ion)<br>Dissociative recombination          | $AB + hv \rightarrow A + B$<br>$AB + M \rightarrow A + B + M$<br>$AB^+ + e^- \rightarrow A + B$         |
| Rearrangement reactions:     | Ion-molecule reaction<br>Charge transfer<br>Neutral reaction   | $A^+ + BC \rightarrow AB^+ + C$<br>$A^+ + B \rightarrow A + B^+$<br>$A + BC \rightarrow AB + C$         |

۱۶-۱- واکنش‌های تشکیل پیوند<sup>۵۳</sup>۱۶-۱-۱- ترکیب تابشی<sup>۵۴</sup>

ترکیب تابشی فرایندی است که در آن دو اتم یا مولکول با هم برخورد می‌کنند و یک واسطه‌ی کوتاه مدت تشکیل می‌دهند که می‌تواند با انتشار تشعشع تثبیت شود.

بقای انرژی و تکانه به این معنی است که محصول یک واکنش ترکیب، که در آن دو واکنش دهنده با هم ترکیب می‌شوند و یک محصول واحد را تشکیل می‌دهند، معمولاً از درون برانگیخته می‌شوند. در شیمی زمینی، چنین واکنش‌هایی معمولاً متکی به برخورد بعدی با «جسم سوم» هستند تا بخشی از انرژی محصول برانگیخته را از بین ببرند و در نتیجه آن را تثبیت کنند. اعداد برخورد کم در یک ابر گازی میان ستاره‌ای یا باعث می‌شود با بازگشت واکنش به سمت واکنش دهنده‌ها یا با از دست دادن فوتون به حالت پایدار برسد.

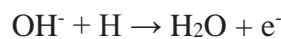
برای مثال:



اگر محصول دارای یک انتقال الکترونی مجاز به حالت پایه باشد، آنگاه ترکیب تابشی می‌تواند بسیار کارآمد باشد. در غیر این صورت، با تکیه بر انتشار فرو سرخ برای آرام کردن مولکول برانگیخته از طریق آرامش ارتعاشی، آهسته خواهد بود. نرخ‌های ثابت برای ترکیب تابشی از  $10^{-17} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  برای برخی دو اتمی‌ها<sup>۵۵</sup> تا  $10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  برای چند اتمی<sup>۵۶</sup> متفاوت است. واکنش‌های ترکیب تابشی می‌تواند به سرعت در یک مرحله یون‌های بزرگ بسازد. مطالعه‌ی آنها در آزمایشگاه دشوار است و اغلب با مطالعه‌ی پرتوهای مشابه برخورد تثبیت شده، بررسی می‌شوند.

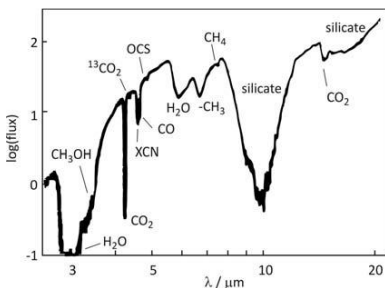
۱۶-۱-۲- ترکیب جدایی<sup>۵۷</sup>

یک یون منفی و یک خنثی با هم ترکیب می‌شوند و یون منفی حاصل یک الکترون را جدا می‌کند. این نوع واکنش برای گونه‌های کوچک نسبتاً رایج است و تصور می‌شود برای گونه‌های بزرگتر نیز رخ دهد. برای مثال:

۱۶-۱-۳- واکنش‌های غبار - دانه - کاتالیست<sup>۵۸</sup>

حدود 1% از جرم فضای میان ستاره‌ای را دانه‌های غبار تشکیل می‌دهد که از باقیمانده‌ی ستارگان در حال مرگ، به ویژه ابرغول‌های سرخ<sup>۵۹</sup> شکل می‌گیرند (به بخش ۱۰ مراجعه کنید). مولکول‌هایی مانند SiO و TiO در لایه‌های بیرونی این ستارگان تشکیل می‌شوند و بادهای ستاره‌ای بزرگی که پس از پایان فاز سوختن هیدروژنی ستاره ایجاد می‌شوند، این مولکول‌ها را به

فضای میان ستاره‌ای می‌برند. جایی که آنها هسته‌های تجمع ذرات گرد و غبار را تشکیل می‌دهند. گرد و غبار به ساختارهای کریستالی تبدیل می‌شود و از طریق جمع آوری اتم‌های اکسیژن از فضای میان ستاره‌ای، هسته‌ی سیلیکاتی به قطر چند صد نانومتر را تشکیل می‌دهد. تراکم مولکول‌های دیگر از درون ابرهای گازی میان ستاره‌ای منجر به یک گوشته‌ی لایه‌ای از یخ در سطح می‌شود که لایه‌های داخلی حاوی مولکول‌های آلی و لایه‌های بیرونی حاوی مولکول‌هایی مانند  $NH_3$ ,  $H_2CO$ , methanol,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2O$  و غیره است. طیفی از غبار میان ستاره‌ای (از ستاره‌ی جوان پرجرم غبار W33A)، با برخی از ویژگی‌های جذب قابل شناسایی برچسب گذاری شده، در شکل سمت چپ داده شده است.



53 Bond formation reactions

54 Radiative association

55 diatomics

56 polyatomics

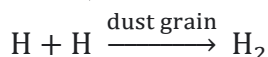
57 Associative detachment

58 Dust-grain-catalysed reactions

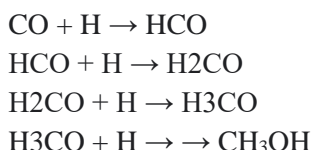
59 Red supergiants

## مبانی شیمی اتمسفر و اخترشیمی

مطالعه‌ی شیمی دانه‌ی غبار دشوار است و هنوز به خوبی درک نشده است. با این حال، مکانیسم‌های موجود برای دانه‌های غبار برای واکنش‌های کاتالیزگری در فضا باید مشابه مکانیسم‌هایی باشد که در کاتالیز سطحی روی زمین نقش دارند. جذب تجزیه‌ای به یک سطح، گونه‌های بسیار واکنش پذیر و مسیرهای واکنش جایگزین را ایجاد می‌کند، و به واکنش‌ها اجازه می‌دهد بسیار سریعتر از فاز-گازی انجام شوند. یک واکنش که از اهمیت حیاتی در فضای میان ستاره‌ای شناخته شده است، به طور انحصاری روی سطح دانه‌های غبار رخ می‌دهد، تشکیل  $H_2$  از دو اتم  $H$  جذب شده به سطح است.



همچنین تصور می‌شود که سنتز آلی<sup>۶۰</sup> در سطح دانه‌های غبار رخ می‌دهد. جذب  $CO$  به سطح یک دانه‌ی غبار، منبع کربنی را برای شروع چنین واکنش‌هایی فراهم می‌کند. برای مثال:



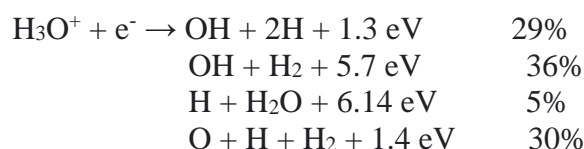
### ۱۶-۲- واکنش‌های شکست پیوند<sup>۶۱</sup>

#### ۱۶-۲-۱- تجزیه در اثر نور و تجزیه در اثر برخورد<sup>۶۲</sup>

هر دوی این فرایندها باید از دوره‌های قبلی شیمی برای شما آشنا باشد. جذب فوتون یا برخورد با جسم سوم انرژی لازم برای شکستن یک پیوند شیمیایی را فراهم می‌کند.

#### ۱۶-۲-۲- نوترکیبی تجزیه‌ای<sup>۶۳</sup>

همان‌طور که از نام آن پیداست، یون با یک الکترون ترکیب می‌شود تا یک ترکیب خنثی با انرژی بالا تولید کند. از آنجایی که برخورد «جسم سوم» برای انتقال انرژی خنثی بسیار بعید است، محصول به گونه‌های خنثی کوچک‌تر تقسیم می‌شود. برای مثال:

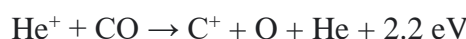


چنین فرایندهایی می‌توانند بسیار سریع باشند، با نرخ‌های ثابت تا  $10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  به طور قابل توجهی سریع‌تر از واکنش‌های یون-مولکول.

### ۱۶-۳- واکنش‌های نوآرایی<sup>۶۴</sup>

#### ۱۶-۳-۱- انتقال بار<sup>۶۵</sup>

انتقال بار شامل انتقال یک الکترون از یک اتم یا مولکول خنثی به یک یون است و ممکن است منجر به تفکیک یون شود. انتقال بار اغلب در جداسازی‌های بزرگ تا  $10 \text{ \AA}$  اتفاق می‌افتد و فرایند دارای سطح مقطع واکنش بزرگی است. یک مثال، انتقال بار تجزیه‌ای از  $He^+$  به  $CO$  (انتقال الکترون از  $CO$  به  $He^+$ ) است:



انرژی یونش بزرگی از  $He$  ( $24.6 \text{ eV}$ ) در طول انتقال بار آزاد می‌شود و منجر به جدا شدن ذرات  $CO^+$  محصول به اجزای اتمی سازنده‌اش می‌شود و این ممکن است از نظر سنتز مولکولی یک گام به عقب به نظر برسد، اما یون  $C^+$  تشکیل شده در این واکنش می‌تواند منجر به واکنش بعدی شود.

60 Organic synthesis

61 Bond breaking reactions

62 Photodissociation and collisional dissociation

63 Dissociative recombination

64 Rearrangement reactions

65 Charge transfer

## مبانی شیمی اتمسفر و اختر شیمی

### ۲-۳-۱۶- واکنش‌های خنثی<sup>۶۶</sup>

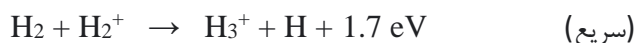
در فضای میان ستاره‌ای واکنش‌های خنثی نسبت به واکنش‌های یون-مولکول کمتر اتفاق می‌افتند زیرا آنها دارای موانع فعال<sup>۶۷</sup> می‌باشند. اما حتی واکنش‌ها با موانع فعال می‌توانند در دماهای بالا و نواحی شوک<sup>۶۸</sup> مهم باشند. برای مثال، هنگامی که یک موج شوک ابرنواختر از یک ابر گازی عبور می‌کند، گاز فشرده می‌شود و می‌تواند تا بیش از 1000 K گرم شود.

### ۳-۳-۱۶- واکنش‌های یون-مولکول<sup>۶۹</sup>

واکنش‌های یون-مولکول معمولاً بدون موانع هستند (اگرچه اغلب ممکن است یک مانع گریز از مرکز<sup>۷۰</sup> وجود داشته باشد) و اکثر واکنش‌های دو مولکولی رخ داده در ISM را تشکیل می‌دهند. واکنش‌های انتقال بار شرح داده شده در بخش ۱، ۳، ۱۶، زیرمجموعه‌ای از واکنش‌های یون-مولکول هستند، اما بسیاری از انواع دیگر نیز وجود دارند. چند مثال در زیر آورده شده است.

### جذب اتم هیدروژن<sup>۷۱</sup>

واکنش‌های جذب اتم H به دلیل فراوانی بالای اتم‌های H در فضای میان ستاره‌ای مهم هستند. یکی از رایج‌ترین واکنش‌ها این است:



این یک واکنش سریع به دلیل فراوانی زیاد هر دو واکنش دهنده است. یون  $\text{H}_3^+$  در فضای میان ستاره‌ای بسیار مهم است و انتقال پروتون مسبب بیشتر واکنش‌های شیمیایی است. نمونه‌ی دیگری از جذب اتم هیدروژن واکنش بین  $\text{H}_2$  و  $\text{NH}_3^+$  است:



این واکنش بسیار کندتر رخ می‌دهد و وابستگی جالبی به دما دارد. این واکنش شامل یک مانع است، به طوری که سرعت با کاهش دما از دمای اتاق به حدود 70 K کاهش می‌یابد. در دماهای پایین‌تر، زمانی که مکانیسم تونل زنی کوانتومی به کار گرفته می‌شود، سرعت دوباره افزایش می‌یابد. تونل زنی در دماهای پایین‌تر آسان‌تر (و در نتیجه سریع‌تر) می‌شود زیرا برخوردها کندتر هستند و واکنش دهنده‌ها زمان بیشتری را در نزدیکی آنها می‌گذرانند. در درون ابرهای مولکولی، واکنش تقریباً به طور کامل از طریق مکانیسم تونل‌زنی انجام می‌شود.

### انتقال پروتون<sup>۷۲</sup>

واکنش‌های انتقال پروتون از گونه‌هایی با میل ترکیبی پروتون کم‌تر به بالاتر است. انتشار انرژی<sup>۷۳</sup> واکنش را می‌توان با تفاوت در جذب پروتون (PA) برای گونه‌های درگیر تعیین کرد. یون  $\text{H}_3^+$  معمولاً در چنین واکنش‌هایی درگیر است. برای مثال:



در این مورد، انتشار انرژی برابر است:

$$\Delta E = \text{PA}(\text{H}_2\text{O}) - \text{PA}(\text{H}_2) = 2.8 \text{ eV}$$

66 Neutral reactions  
67 Activation barriers  
68 Shocked regions  
69 Ion-molecule reactions  
70 Centrifugal barrier  
71 Hydrogen atom abstraction  
72 Proton transfer  
73 Exoergicity

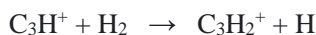


درج کربن<sup>۷۴</sup>

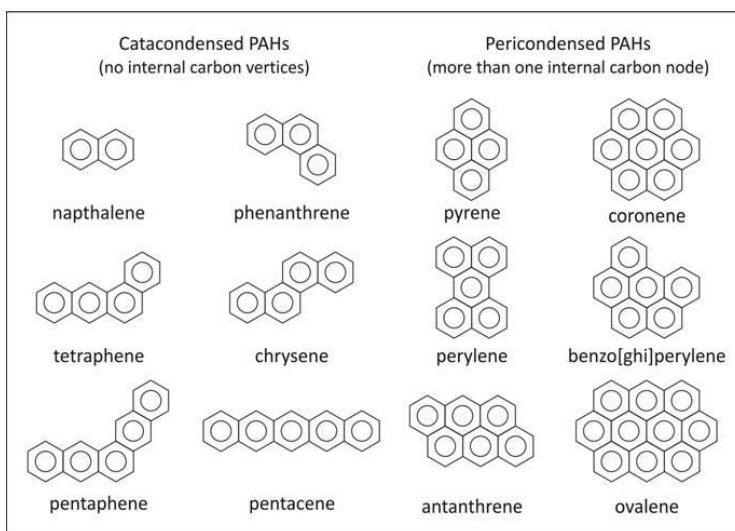
واکنش‌های درج کربن شامل وارد کردن یون  $C^+$  در یک زنجیره‌ی کربنی است. برای حفظ تکانه، یک اتم یا الکترون باید در طول فرایند به بیرون پرتاب شود. برای مثال:



این واکنش‌ها در سنتز بسیاری از مولکول‌های حاوی کربن در فضای میان ستاره‌ای مهم هستند. به عنوان مثال، یون  $C_3H^+$  تشکیل شده در واکنش فوق می‌تواند به واکنش بیشتر ادامه دهد و در نهایت  $C_3H_2$  حلقوی را از طریق دنباله‌ای از مراحل شامل جذب هیدروژن و دوباره ترکیب یون-الکترون تشکیل دهد.



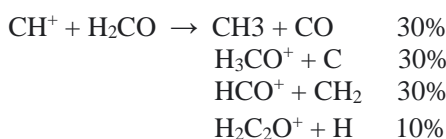
فرایند درج کربن می‌تواند منجر به تشکیل گونه‌های آلی بسیار بزرگی شود که به عنوان هیدروکربن‌های آروماتیک چند حلقه‌ای<sup>۷۵</sup> شناخته می‌شوند، ساختارهای حلقه‌ای آروماتیک بزرگ از نوع نشان داده شده در شکل زیر می‌باشند:



واکنش‌های درج کربن منجر به تشکیل زنجیره‌های کربنی در یک سری مراحل پیچیده می‌شود. پس از آن، واکنش شیمیایی رادیکال-رادیکال و کاتالیزگر-غبار-غبار<sup>۷۶</sup> بیشتر منجر به تشکیل حلقه و انتشار بیشتر زنجیره می‌شود. چگالی PAH ها در فضای میان ستاره‌ای به طور قطعی تعیین نشده است، اما ممکن است با چگالی گونه‌های ساده‌ی دیگر مانند  $CN$ ،  $CH$ ،  $OH$  و  $H_2O$  قابل مقایسه باشد و تا 20% کربن موجود در فضای میان ستاره‌ای را تشکیل می‌دهد.

واکنش‌های نوآرایی<sup>۷۷</sup>

این واکنش‌ها معمولاً از طریق یک مجموعه برخورد رخ می‌دهند. مقدار زیادی از نوآرایی می‌تواند در مجموعه انرژی بالا رخ دهد، که منجر به تکه تکه شدن به مجموعه‌های مختلف محصولات می‌شود. سپس این محصولات می‌توانند به واکنش‌های بیشتری ادامه دهند که منجر به یک واکنش‌های شیمیایی غنی از یون می‌شود. واکنش‌های نوآرایی اغلب برای جفت کردن توالی واکنش‌های مختلف مهم هستند. یک مثال ساده از واکنش نوآرایی، واکنش بین  $CH^+$  و  $H_2CO$  است.



74 Carbon insertion

75 Polycyclic aromatic hydrocarbons

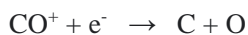
76 Dust-grain-catalysed

77 Rearrangement reactions

## ۱۷- فرایندهای خنثی سازی در فضای میان ستاره‌ای

همانطور که در بخش ۱۴ اشاره شد، بیشتر مولکول‌های مشاهده شده در فضای میان ستاره‌ای خنثی هستند، در حالی که محصولات واکنش‌های یون-مولکول که در بخش قبل مورد بحث قرار گرفت، یونی هستند. تعدادی مسیر وجود دارد که توسط آنها یک یون ممکن است به یک مولکول خنثی در فضای میان ستاره‌ای تبدیل شود. ما قبلاً به یکی از این موارد پرداختیم. در نوترکیب تجزیه‌ای یون-الکترون (بخش ۱۶،۲،۲)، یون و الکترون با هم ترکیب می‌شوند تا یک ذره‌ی خنثی را تشکیل دهند که سپس به دو یا چند محصول خنثی تقسیم می‌شود. به طور مشابه، یک یون منفی و یک یون مثبت ممکن است دوباره ترکیب شوند و یک کمپلکس خنثی<sup>۷۸</sup> تشکیل دهند که به محصولات خنثی تجزیه می‌شود.

چند مثال:



electron-ion dissociative recombination



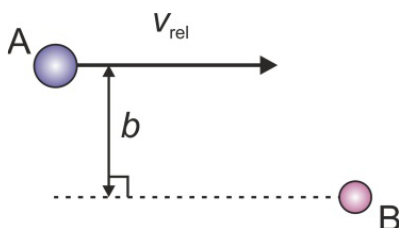
electron-ion dissociative recombination



ion-ion dissociative recombination

## ۱۸- یک مدل ساده برای محاسبه‌ی سرعت واکنش‌های یون-مولکول

محاسبات پیشرفته QCT<sup>۷۹</sup> و پراکندگی کوانتومی قادر به پیش‌بینی مقاطع واکنش و ثابت‌های سرعت برای واکنش‌های یون-مولکول هستند. با این حال، این محاسبات تنها زمانی امکان پذیر است که یک سطح انرژی پتانسیل دقیق برای واکنش مورد مطالعه در دسترس باشد، که اغلب اینطور نیست. در ادامه، نشان خواهیم داد که چگونه می‌توانیم از اصول اولیه‌ی فیزیک برخورد برای درک عوامل کلیدی تعیین‌کننده‌ی سرعت واکنش‌های یون-مولکول، و ایجاد یک عبارت ساده برای محاسبه تقریبی ثابت‌های سرعت استفاده کنیم. مدلی که ما به دست خواهیم آورد به عنوان **مدل لانژوین<sup>۸۰</sup>** شناخته می‌شود و ساده‌ترین نظریه از انواع تئوری‌های جذب است که برای توصیف سرعت واکنش‌های یون-مولکول ایجاد شده است. چنین مدل‌هایی فرض می‌کنند که واکنش توسط بخش دوربرد پتانسیل تعامل کنترل می‌شود، منطقه‌ای که می‌تواند به طور کلاسیک با یک تقریب معقول رفتار شود. برای توسعه‌ی مدل لانژوین، باید مفاهیم پارامتر ضربه، تکانه‌ی زاویه‌ای مدار و موانع گریز از مرکز را معرفی کنیم. این موضوع برای کسی که دینامیک واکنش مولکولی را مطالعه کرده باشد آشنا خواهد بود. پارامتر ضربه، جداسازی عمود اولیه‌ی مسیرهای شرکای برخورد را اندازه‌گیری می‌کند. اساساً، این فاصله‌ای است که جفت برخورد کننده اگر به هیچ وجه برهم‌کنش نداشته باشند، یکدیگر را از دست می‌دهند و می‌توان با برون‌یابی مسیرهای خط مستقیم اولیه‌ی ذرات در جدایی‌های بزرگ تا رسیدن به نزدیک‌ترین فاصله، آن را پیدا کرد.



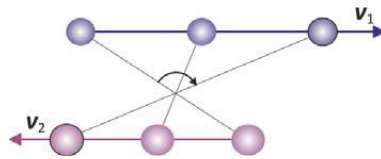
در زمینه‌ی یک برخورد، تکانه‌ی زاویه‌ای مدار یک تکانه‌ی زاویه‌ای است که با حرکت نسبی شرکای برخورد در حین نزدیک شدن و برخورد آنها مرتبط است. نباید آن را با تکانه‌ی زاویه‌ای مدار مکانیکی کوانتومی الکترون در یک اوربیتال اتمی اشتباه گرفت. حتی برای دو ذره که در خطوط کاملاً مستقیم حرکت می‌کنند، وقتی حرکت نسبی آنها در نظر گرفته شود، یک تکانه‌ی زاویه‌ای مدار مرتبط وجود دارد. ما می‌توانیم این را با نگاه کردن به خط مرکز دو ذره در نقاط مختلف مسیر حرکتشان نشان دهیم.

78 Neutral complex

79 Quantum Chemical Topology

80 Langevin model

## مبانی شیمی اتمسفر و اختر شیمی



همانطور که می بینیم اگرچه ذرات در خطوط مستقیم حرکت می کنند، خط مراکز ذرات حول مرکز جرم آنها می چرخد. فقط سر در برخورد با پارامتر ضربه  $b=0$  هیچ تکانه‌ی زاویه‌ای مداری مرتبگی ندارد.

از نظر ریاضی، تکانه‌ی زاویه‌ای مداری برای یک جفت ذره در حال برخورد برابر است با:

$$L = r \times p \quad \text{معادله ۱-۱۸}$$

که  $r$  (برداری) جدایی ذرات و  $p = \mu v_{rel}$  تکانه‌ی خطی نسبی آنهاست ( $m$  جرم کاهش یافته‌ی ذرات است و  $v_{rel} = v_1 - v_2$  سرعت نسبی آنها است). بنابراین می توانیم قدر مطلق  $L$  را از رابطه‌ی زیر بدست آوریم:

$$|L| = |r \times p| = |\mu r v_{rel}| = \mu v_{rel} r \sin \theta \quad \text{معادله ۲-۱۸}$$

که در آن  $\theta$  زاویه‌ی بین  $r$  و  $v_{rel}$  است. در جداسازی‌های بزرگ،  $r \sin \theta$  به طور ساده برابر با پارامتر ضربه  $b$  می‌باشد:

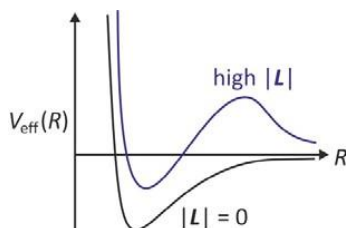
$$|L| = \mu v_{rel} b \quad \text{معادله ۳-۱۸}$$

زیرا تکانه‌ی زاویه‌ای کل (مجموع تکانه‌ی زاویه‌ی مداری  $L$  و هر تکانه‌ی زاویه‌ای چرخشی  $J$  شرکای برخورد) باید در طول برخورد حفظ شود، این مطلب با این فرض که حالت چرخشی ذرات تغییر نکند تا زمانی که ذرات با هم برخورد کنند، درست می‌باشد.

انرژی جنبشی نسبی دو ذره را می‌توان به صورت مجموع انرژی جنبشی آنها نسبت به مرکز جرم، یا به عنوان مجموع انرژی جنبشی  $\frac{1}{2} \mu v_{rad}^2$  مرتبط با مولفه‌ی سرعت شعاعی  $v_{rad}$  در امتداد خط مراکز آنها (خط اتصال دو ذره) و انرژی جنبشی  $L^2/2I$  مرتبط با حرکت مداری آنها (که  $I = \mu r^2$  تکانه‌ی اینرسی مولکول‌ها است) نوشت. از آنجایی که تکانه‌ی زاویه‌ای باید در تمام طول برخورد حفظ شود، انرژی جنبشی مرتبط با حرکت مداری برای غلبه بر مانع فعال سازی در دسترس نیست و از آنجایی که اثر آن بر کاهش انرژی موجود است، این اصطلاح اغلب به عنوان مانع گریز از مرکز شناخته می‌شود. اصطلاح مانع گریز از مرکز اغلب با سطح انرژی پتانسیل ترکیب می‌شود تا یک پتانسیل مؤثر به دست دهد. یعنی:

$$v_{eff}(r) = v(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2} \quad \text{معادله ۴-۱۸}$$

همانطور که در شکل زیر نشان داده شده است، مانع گریز از مرکز می‌تواند مانع مؤثری برای واکنش ایجاد کند، حتی زمانی که سطح انرژی پتانسیل خود هیچ مانعی نداشته باشد.



## مبانی شیمی اتمسفر و اختر شیمی

با استفاده از معادله‌ی  $L^2 = \mu^2 v_{rel}^2 b^2$  (معادله ۱۸،۳)، می‌توانیم پتانسیل مؤثر را به صورت زیر بازنویسی کنیم.

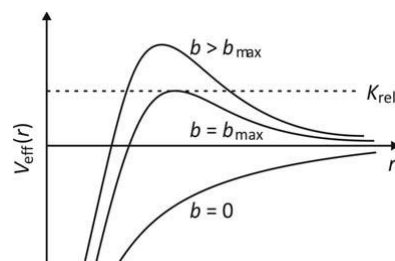
$$v_{eff}(r) = v(r) + \frac{\mu v_{rel}^2 b^2}{2r^2} \quad \text{معادله ۱۸-۵}$$

همانطور که می‌بینیم با پارامترهای ضربه‌ی بزرگ برای سیستم‌های سنگین، مانع بزرگترین خواهد بود. مانع گریز از مرکز اغلب اثر کاهش پارامتر ضربه‌ی ماکزیمم را دارد که می‌تواند منجر به واکنش موفقیت آمیز شود و در نتیجه سطح مقطع واکنش را کاهش می‌دهد.

با بازگشت به واکنش یون-مولکول خودمان، اکنون می‌توانیم یک معادله برای پتانسیل مؤثر برای بخش جذاب پتانسیل دوربرد بنویسیم. پتانسیل مؤثر در این منطقه شامل برهم‌کنش‌های دوقطبی القا شده با یون، برهم‌کنش‌های دوقطبی دائمی یون (اگر مولکول خنثی دارای دوقطبی دائمی باشد)، برهم‌کنش‌های چهارقطبی یون، و غیره، و همچنین مؤلفه نشان‌دهنده مانع گریز از مرکز می‌باشد. ما فقط ساده‌ترین حالت را در نظر می‌گیریم که در آن مولکول دوقطبی دائمی ندارد و تنها شامل مشارکت برهم‌کنش دوقطبی ناشی از یون و مانع گریز از مرکز برای پتانسیل مؤثر می‌شود. در نتیجه پتانسیل دوربرد عبارت است از:

$$v_{eff}(r) = -\frac{\alpha q^2}{8\pi\epsilon_0 r^4} + \frac{\mu v_{rel}^2 b^2}{2r^2} \quad \text{معادله ۱۸-۶}$$

با نزدیک شدن واکنش دهنده‌ها، در ابتدا انرژی جنبشی حرکت نسبی آنها برابر با  $K_{rel} = \frac{1}{2}\mu v_{rel}^2$  می‌باشد. همانطور که آنها مانع گریز از مرکز را تجربه می‌کنند، مقداری از این انرژی جنبشی به انرژی پتانسیل تبدیل می‌شود. برای اینکه واکنش دهنده‌ها بر مانع غلبه کنند و واکنش انجام شود، انرژی جنبشی اولیه باید بیشتر از ارتفاع مانع باشد، یعنی:  $K_{rel} > V_{eff}(r_{max})$  که در آن  $r_{max}$  موقعیت مانع است. این به صورت یک نمودار در زیر برای تعدادی از مقادیر مختلف پارامتر  $b$  نشان داده شده است. از آنجایی که ارتفاع مانع گریز از مرکز توسط پارامتر ضربه تعیین می‌شود، یک پارامتر ضربه‌ی حداکثر  $b_{max}$  وجود خواهد داشت که فراتر از آن ذرات انرژی کافی برای واکنش ندارند. در ادامه نشان خواهیم داد که با تعیین  $b_{max}$ ، می‌توانیم مقدار ثابت نرخ را محاسبه کنیم.



برای یافتن مقدار  $r$  جایی که  $V_{eff}(r)$  ماکزیمم است، معادله‌ی زیر را حل می‌کنیم:

$$\frac{d v_{eff}(r)}{d r} = 0 \quad \text{معادله ۱۸-۷}$$

پس از مقداری عملیات جبری (که به عنوان تمرینی ساده برای خواننده باقی مانده است)، به دست می‌آوریم:

$$r_{max} = \left( \frac{\alpha q^2}{2\pi\epsilon_0 \mu v_{rel}^2 b^2} \right)^{1/2} \quad \text{معادله ۱۸-۸}$$

بنابراین ارتفاع مانع برابر است با:

$$v_{eff}(r_{max}) = -\frac{\alpha q^2}{8\pi\epsilon_0 r_{max}^4} + \frac{\mu v_{rel}^2 b^2}{2r_{max}^2} = \frac{\pi\epsilon_0\mu^2 v_{rel}^4 b^4}{2\alpha q^2} \quad \text{معادله ۹-۱۸}$$

برای اینکه واکنش رخ دهد، ما به  $K_{rel} \geq V_{eff}(r_{max})$  نیاز داریم. یعنی:

$$\frac{1}{2} \mu v_{rel}^2 \geq \frac{\pi\epsilon_0\mu^2 v_{rel}^4 b^4}{2\alpha q^2} \quad \text{معادله ۱۰-۱۸}$$

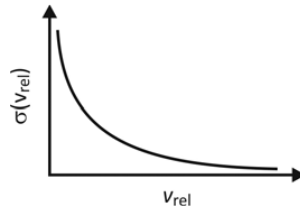
با مرتب کردن معادله‌ی بالا، متوجه می‌شویم که حداکثر پارامتر مؤثر برای آن واکنش، می‌تواند توسط رابطه زیر بیان شود:

$$b^2 \leq \left( \frac{\alpha q^2}{\pi\epsilon_0\mu v_{rel}^2} \right)^{1/2} \quad \text{معادله ۱۱-۱۸}$$

آنگاه سطح مقطع واکنش برابر است با:

$$\sigma_r(v_{rel}) = \pi b_{max}^2 = \pi \left( \frac{\alpha q^2}{\pi\epsilon_0\mu v_{rel}^2} \right)^{1/2} \quad \text{معادله ۱۲-۱۸}$$

با توجه به این معادله (گاهی اوقات به عنوان سطح مقطع لانگزویین<sup>۸۱</sup> شناخته می‌شود)، سطح مقطع واکنش یک وابستگی  $1/v_{rel}$  به سرعت نسبی واکنش دهنده دارد و شکل زیر را به خود می‌گیرد. توجه داشته باشید اگرچه با اثر خالص کاهش چشمگیر سطح مقطع به عنوان افزایش سرعت نسبی انرژی جنبشی واکنش دهنده با  $v_{rel}$  افزایش می‌یابد، همینطور مانع گریز از مرکز نیز افزایش می‌یابد.



از تئوری برخورد ساده، ثابت نرخ برای یک سرعت نسبی معین با رابطه‌ی  $k(v_{rel}) = \sigma_r(v_{rel})v_{rel}$  به دست می‌آید و ثابت نرخ حرارتی را می‌توان با ادغام ثابت نرخ بر روی توزیع ماکسول بولتزمن  $f(v_{rel})$  پیدا کرد. (با فرض توزیع حرارتی سرعت‌ها)، در نتیجه:

$$\begin{aligned} k(T) &= \int_0^{\infty} v_{rel} \sigma_r(v_{rel}) f(v_{rel}) dv_{rel} \\ &= \int_0^{\infty} v_{rel} \pi \left( \frac{\alpha q^2}{\pi\epsilon_0\mu v_{rel}^2} \right)^{1/2} f(v_{rel}) dv_{rel} \quad (\sigma_r(v_{rel}) \text{ با جایگزینی}) \\ &= \left( \frac{\pi\alpha q^2}{\epsilon_0\mu} \right)^{1/2} \int_0^{\infty} f(v_{rel}) dv_{rel} \\ &= \left( \frac{\pi\alpha q^2}{\epsilon_0\mu} \right)^{1/2} \quad (\text{از آنجایی که } f(v_{rel}) \text{ نرمال شده است}) \end{aligned} \quad \text{معادله ۱۳-۱۸}$$

<sup>81</sup> Langevin cross section



توجه داشته باشید از آنجایی که ما فقط امکان وجود یک مانع گریز از مرکز در برابر واکنش را در نظر گرفته‌ایم (یعنی هرگونه مانع واقعی را که ممکن است در سطح انرژی پتانسیل وجود داشته باشد نادیده گرفته‌ایم)، این عبارت یک حد بالایی برای ضریب نرخ برخورد برای یک واکنش یون-مولکول را نشان می‌دهد. یک نکته‌ی کلیدی که باید به آن توجه داشت این است که ثابت نرخ حرارتی که ما به دست آورده‌ایم مطابق با بحث قبلی ما در مورد واکنش‌های یون-مولکول، مستقل از دما است.

مدل‌های پیچیده‌تری برای مدل‌سازی سرعت واکنش یون-مولکول وجود دارد. اینها شامل مدل‌های مکانیک کوانتوم مانند تئوری جذب آدیاباتیک و تقریب ناگهانی گریز از مرکز (ACCSA)<sup>۸۲</sup> می‌شود که حالت‌های چرخشی واکنش‌دهنده‌ها، نظریه‌ی حالت گذار متغیر<sup>۸۳</sup> و محاسبات مسیر حرکت را در نظر می‌گیرد. دو رویکرد اخیر نیازمند دانش دقیق و منطقی از سطح انرژی پتانسیل واکنش است. تئوری حالت گذار متغیر یک نسخه‌ی بهبود یافته از نظریه حالت گذار<sup>۸۴</sup> است که شما در دروس مکانیک آماری با آن آشنا شده‌اید. خط سیر محاسبات مسیر حرکت در بخش دینامیک واکنش مولکولی<sup>۸۵</sup> پوشش داده شده است.

### ۱۹- اخترشیمی مبتنی بر آزمایشگاه

درحالی‌که مشاهدات نجومی داده‌های خامی را در مورد شرایط فیزیکی در مناطق مختلف فضا و گونه‌های اتمی و مولکولی موجود ارائه می‌دهند، تفسیر چنین داده‌هایی تنها در نتیجه‌ی مطالعات آزمایشگاهی طیف گسترده‌ای از فرایندهای اتمی و مولکولی اساسی امکان‌پذیر است. برای مثال، شناسایی مولکولی از طریق تخصیص خطوط طیفی ثبت شده با استفاده از تلسکوپ، تنها از طریق مقایسه با طیف‌های ثبت شده روی زمین (اگر مولکول مورد نظر به اندازه‌ی کافی پایدار باشد و بتواند در مقادیر کافی برای تشخیص تولید شود) یا طیف‌های شبیه‌سازی شده بر روی زمین قابل دست‌یابی می‌باشد. مبنای محاسبات ساختار الکترونی مدل‌های جنبشی شیمی میان ستاره‌ای نیاز به دانش ثابت‌های سرعت برای گام‌های شیمیایی جداگانه دارند، که دوباره یا باید در آزمایشگاه اندازه‌گیری شوند یا به صورت نظری مدل‌سازی شوند. درک شیمی کمپلکس<sup>۸۶</sup> روی سطح دانه‌های غبار میان ستاره‌ای نیازمند توسعه‌ی شبیه‌سازی آزمایشگاهی مناسب و روش‌هایی برای مطالعه‌ی آنها است. در بسیاری از موارد، تراکم تعداد بسیار بالاتر درگیر در آزمایش‌های آزمایشگاهی، همراه با حساسیت‌های آشکارسازی بسیار بالا که برای طیف وسیعی از مولکول‌های مورد علاقه قابل دست‌یابی است، به این معنی است که اغلب می‌توان فرایندهایی را چند دقیقه در آزمایشگاه شبیه‌سازی کرد که طی میلیون‌ها سال در فضا رخ می‌دهند.

اخترشیمی مبتنی بر آزمایشگاه یک زمینه‌ی در حال رشد و یک زمین بازی ایده‌آل برای شیمی فیزیک‌دانان است.

### ۲۰- چالش بزرگ: مدل‌سازی شیمیایی ابرهای مولکولی غول‌آسا

شاید هدف نهایی جامعه‌ی اخترشیمی توسعه‌ی یک مدل شیمیایی کامل از یک ابر گازی میان ستاره‌ای باشد. در میان چیزهای دیگر، چنین مدل‌هایی اجازه می‌دهند سن ابر مولکولی بر اساس اندازه‌گیری‌های ترکیب اتمی آن تخمین زده شود.

تکنیک‌های مورد استفاده برای مدل‌سازی ابرهای مولکولی بسیار شبیه به روش‌هایی است که برای مدل‌سازی فرایندهای شیمیایی در جو زمین ایجاد شده‌اند. با این حال، ناشناخته‌های بسیار بیشتری در مدل‌سازی ابرهای گازی میان ستاره‌ای نسبت به مدل‌های جوی وجود دارد. بسیاری از ثابت‌های سرعت، به‌ویژه برای واکنش‌هایی که روی دانه‌های غبار رخ می‌دهند، ناشناخته هستند و اندازه‌گیری‌های روی ابرهای گازی برای تعیین پارامترهایی مانند دما و چگالی نمی‌توانند به طور مستقیم به همان روشی که در جو زمین صورت می‌پذیرد، انجام شود. با این وجود، فرایند تنظیم و حل یک مدل جنبشی از همان اصول کلی پیروی می‌کند که برای یک مدل جوی وجود دارد و پارامترهای مشابه باید اندازه‌گیری شوند:

82 Adiabatic Capture and Centrifugal Cudden Approximation theory

83 Variational transition state theory,

84 transition state theory

85 Molecular Reaction Dynamics

86 complex chemistry

- ۱) داده‌های مربوط به ترکیب‌های شیمیایی ابر از مشاهدات آزمایشگاهی گرفته شده است. در حالت ایده‌آل، ما چگالی عددی دقیقی برای همه‌ی گونه‌های شیمیایی درون ابر، از جمله الکترون‌ها را خواهیم داشت.
- ۲) شرایط فیزیکی درون ابر از جمله دما، چگالی، دمای الکترون، میدان تشعشع و ضریب انقراض (که برای تخمین ترکیب غبار استفاده می‌شود) مورد نیاز است. این شرایط به طور کلی در سراسر ابر ثابت نخواهد بود. برای مثال در بادهای ستاره‌ای، انفجارهای ستاره‌ای مثل ابرنواختر و آشفستگی‌های تصادفی افت و خیز خواهد داشت. در حالی که دما توسط تعادل گرمای ورودی حاصل از تابش و واکنش‌های شیمیایی گرمازا تعیین می‌شود. و تلفات حرارتی، در درجه‌ی اول تلفات تشعشعی همراه با آرامش گونه‌های اتمی و مولکولی از حالت‌های برانگیخته است. میدان تابش با نزدیکی به ستارگان نزدیک و انقراض توسط غبار میان ستاره‌ای تعیین می‌شود.
- ۳) همچنین فرایندهای جابجایی باید در نظر گرفته شود، که اینها شامل انتشار و برخورد<sup>۸۷</sup>، و همچنین پدیده‌های بیرونی‌تر مانند جبهه‌ی شوک عبوری از ابرها<sup>۸۸</sup>، و تلاطم مغناطیسی<sup>۸۹</sup> است.
- ۴) تخمین میدان تابشی ناشی از ستارگان تازه تشکیل شده در ابر به منظور محاسبه‌ی فرایندهای فتوشیمیایی که در این مناطق رخ می‌دهند، هم مهم هستند.
- ۵) نرخ‌های واکنش دقیق برای همه‌ی فرایندهای شیمیایی که در ابر اتفاق می‌افتند مورد نیاز است. اغلب اینها شناخته شده نیستند و باید تخمین زده یا مدل شوند.
- ۶) واکنش‌هایی که باید در مدل گنجانده شود باید همراه با گونه‌های هدف که با داده‌های تجربی موجود مقایسه می‌شود. تصمیم گیری شود.

هنگامی که تمام پارامترهای مورد نیاز مقداردهی شد، می‌توانیم معادلات سرعت، مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل جفت شده را تنظیم کنیم و آنها را به صورت عددی در زمان انتشار دهیم تا غلظت گونه‌های هدف را پیش‌بینی کنیم. برخی از پارامترها، به عنوان مثال ترکیب شیمیایی ابر و گاهی اوقات دما در مناطق مختلف را می‌توان از داده‌های مشاهدات نجومی (به بخش‌های ۲ تا ۴ مراجعه کنید) در ترکیب با داده‌های محاسبات شیمی کوانتومی تعیین کرد. پارامترهای دیگر، مانند ثابت‌های سرعت، باید در مطالعات مبتنی بر آزمایشگاه، از طریق اندازه‌گیری تجربی یا مدل‌سازی نظری، تعیین شوند.

علاوه بر چالش بزرگ توسعه‌ی یک مدل شیمیایی کامل از یک ابر گازی میان ستاره‌ای، تعدادی از مشکلات خاص‌تر در اخترشیمی در حال حاضر توجه ویژه‌ای از جامعه‌ی تحقیقاتی را به خود جلب کرده است. در ادامه دو مثال آورده شده است.

### ۲۱- جستجو برای مولکول‌های بیولوژیکی

علاقه‌ی زیادی به کشف مولکول‌های بیولوژیکی در فضای میان ستاره‌ای وجود دارد، زیرا حضور آنها گام مهمی در جستجوی حیات فرازمینی و همچنین به طور بالقوه ارائه‌ی بینشی در مورد منشاء حیات بر روی زمین است. به نظر می‌رسد مطالعات مبتنی بر آزمایشگاه نشان می‌دهد که مکانیزم‌های امکان‌پذیری تولید اسیدهای آمینه‌ی ساده تحت شرایطی در ابرهای گازی میان ستاره‌ای وجود دارد و گلیسین<sup>۹۰</sup> (ساده‌ترین اسید آمینه) و شاید دیگر مولکول‌های زیست‌زا باید به اندازه‌ی کافی فراوان باشند تا بتوان آنها را شناسایی کرد. با این حال، تا به امروز تنها یک مورد شناسایی گلیسین گزارش شده است، و این مورد بیش از آن که تأیید شود مورد تردید قرار گرفته است<sup>۹۱</sup>.

87 diffusion and collisions

88 shock fronts transiting the clouds

89 magnetic turbulence

90 Glycin

91 Y-J Kuan, S. B. Charnley, H-C. Huang, W-OL. Tseng, and Z. Kisiel, Interstellar glycine, *Astrophys. J.*, 593, 848-867 (2003).

۲۲- نوارهای پراکنده‌ی میان ستاره‌ای<sup>۹۲</sup>

مجموعه‌ای از ویژگی‌های جذب شناخته شده است که به عنوان نوارهای پراکنده‌ی میان ستاره‌ای، شاید طولانی‌ترین معمای موجود در طیف سنجی نجومی را نشان دهد. اولین مورد از این نوارها در سال ۱۹۲۲ گزارش شد<sup>۹۳</sup> و اکنون تعداد آنها بیش از ۴۰۰ است که در سراسر طیف فرابنفش، مرئی و فرو سرخ قرار دارند. برخلاف توافق عمومی مبنی بر اینکه جذب‌ها اغلب به دلیل مولکول‌های آلی بزرگ در فضای میان ستاره‌ای هستند، تا به امروز هیچ قطعیتی وجود نداشته است. PAH ها (به بخش ۱۶,۳,۳ مراجعه کنید)، زنجیره‌های کربنی، و فولرن‌ها<sup>۹۴</sup> همگی به عنوان کاندیدی احتمالی برای جذب نوار میان ستاره‌ای منتشر شده‌اند. با این حال، مطالعه‌ی طیف‌سنجی این گونه‌ها در آزمایشگاه دشوار است و مدل‌سازی دقیق از طریق محاسبات ساختار الکترونی چالش برانگیز است. از مطالعات حالت جامد مشخص شده است که کاتیون‌های<sup>۹۵</sup> PAH شامل ۳۰ یا بیشتر اتم کربن به شدت در قسمت مرئی جذب می‌شوند، درحالی‌که اتم‌های خنثی مربوطه در پرتو فرابنفش جذب می‌شوند، اما اگر قرار است مطالعات طیف سنجی با وضوح بالا انجام شود، تولید و نگهداری چنین گونه‌های بزرگ در فاز-گاز بسیار دشوار است.

درحالی‌که نوارهای انتشار فرسرخ ناشی از انتقال ارتعاشی PAH ها تقریباً مشابه هستند، طیف‌های الکترونی برای هر مولکول بسیار مشخص است. اگر مشکلات ذکر شده در بالا برطرف شود و طیف‌های آزمایشگاهی برای PAH های بزرگ در دسترس قرار گیرند، احتمالاً مولکول‌های مشخصی در فضای بین ستاره‌ای شناسایی خواهند شد.

۲۳- مروری بر اخترشیمی<sup>۹۶</sup>

این دوره مروری مختصر بر انواع فرایندهای شیمیایی رخ داده در فضای میان ستاره‌ای ارائه کرده است که با سنتز عناصر شیمیایی در ستارگان شروع می‌شود و با خلاصه‌ای از فرایندهای مختلف که منجر به تشکیل مولکول‌های پیچیده درون ابرهای گازی میان ستاره‌ای می‌شود، ادامه می‌یابد. ما همچنین طیف وسیعی از روش‌های تئوری و تجربی را در نظر گرفته‌ایم که ممکن است برای کمک به شناسایی مولکول‌ها در فضا و کشف فرایندهای شیمیایی که توسط آنها تشکیل می‌شوند، استفاده شود.

در زمینه‌ی اخترشیمی چیزهای بیشتری وجود دارد. ما حتی به شیمی و فیزیک شهاب‌سنگ‌ها و دنباله‌دارها یا وقایع منتهی به شکل‌گیری سیارات و شیمی بعدی آنها نپرداخته‌ایم. اخترشیمی یک زمینه‌ی جذاب و به سرعت در حال تکامل است که در آن شیمی فیزیک‌دانان، در تفسیر داده‌های مشاهده‌ای از طریق دانش ما از طیف سنجی، در مدل‌سازی جنبشی چرخه‌های واکنش، و در اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی ثابت‌های سرعت و تحقیقات در مورد مکانیسم‌های واکنش، مطالب زیادی برای ارائه دارند.

92 Diffuse Interstellar Bands (DIBs)

93 M. L. Heger, further study of the sodium lines in class B stars; the spectra of certain class B stars in the regions 5630 A – 6680 A and 3280 A to 3380 A; Note on the spectrum of g Cassiopeiae between 5860 A and 6600 A. *Lick Observatory Bull.*, **337**, 141-148, (1922).

94 Fullerenes

95 Cations

96 Astrochemistry