

# EGZOTIKUS MOLEKULAFIZIKA: MI AZ A $H_3^+$ , ÉS MI A SZEREPE A CSILLAGKÖZI KÉMIÁBAN?

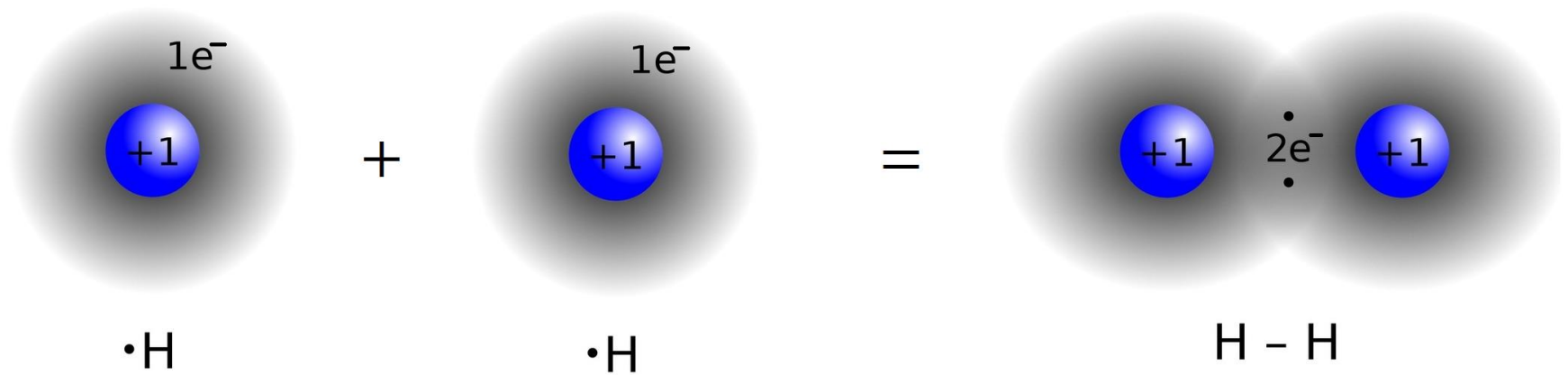
KÉSZÍTETTE:

SZIDAROVSKY TAMÁS  
ELTE TTK KÉMIAI INTÉZET

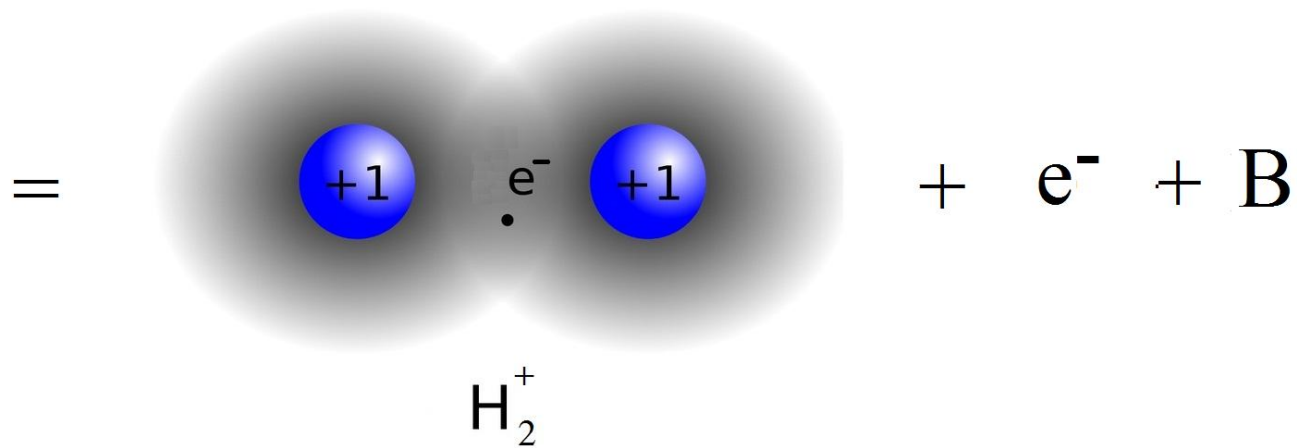
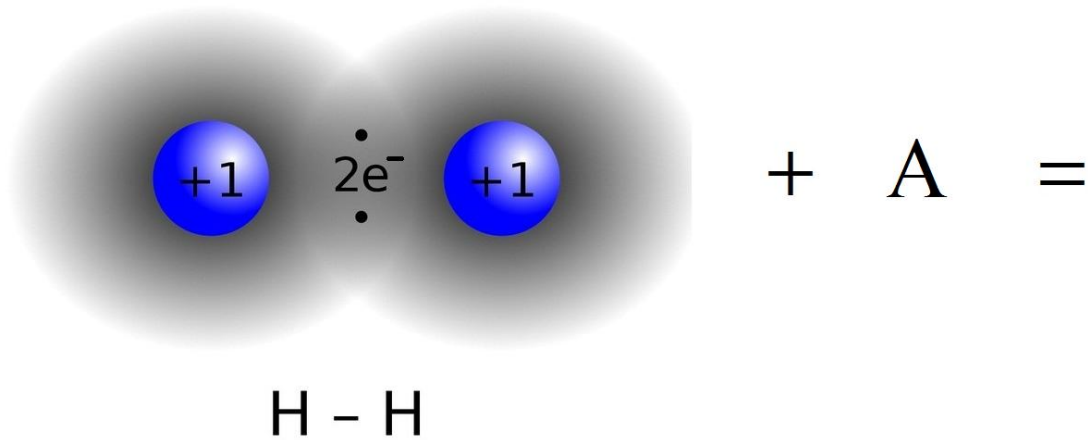
# Áttekintés

- Mi is az a  $\text{H}_3^+$  ? Keletkezése és felfedezése.
- Spektroszkópia,  $\text{H}_3^+$  a Földön
- $\text{H}_3^+$  a Naprendszerben
- $\text{H}_3^+$  a Naprendszeren túl

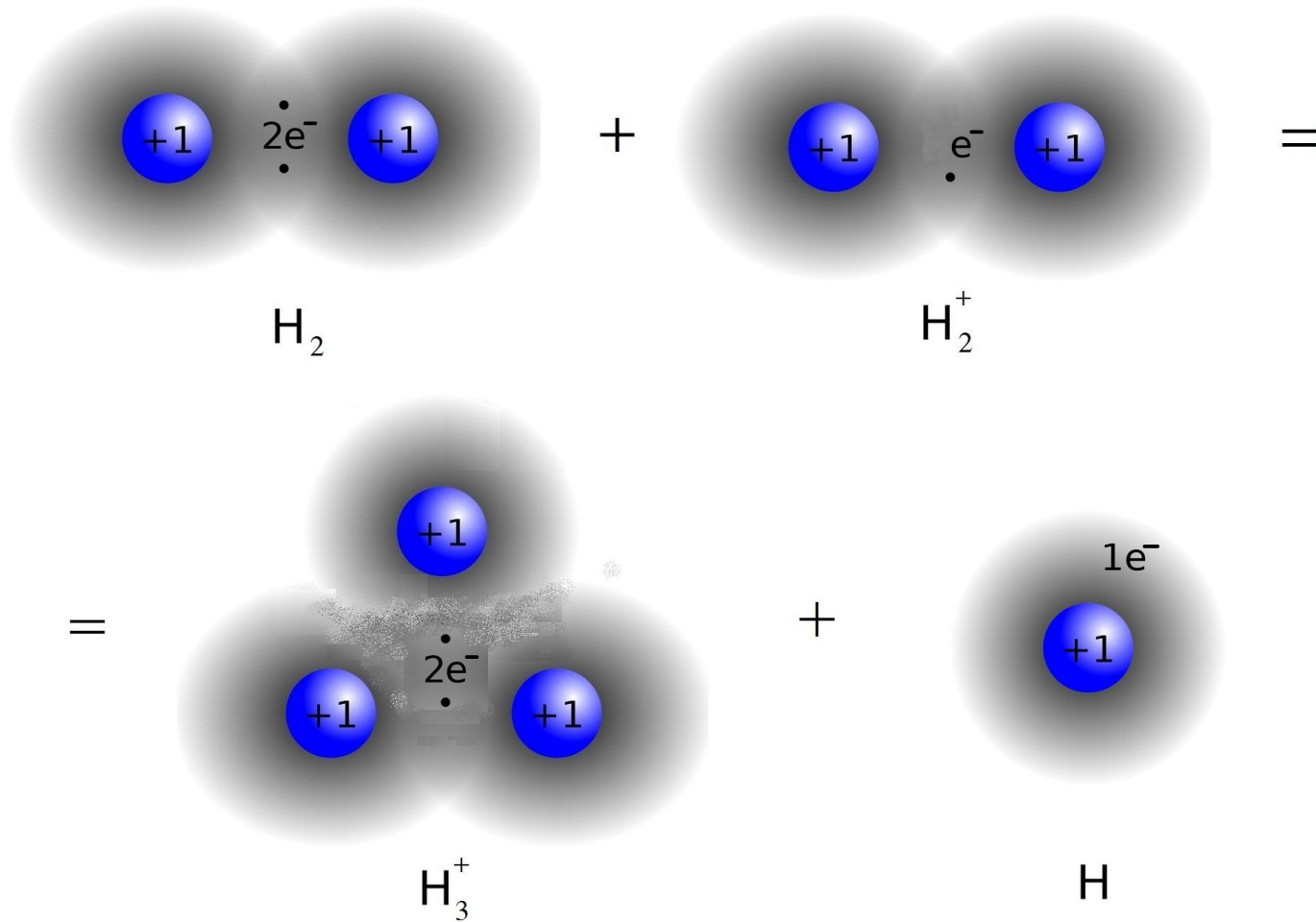
# Kovalens kötés



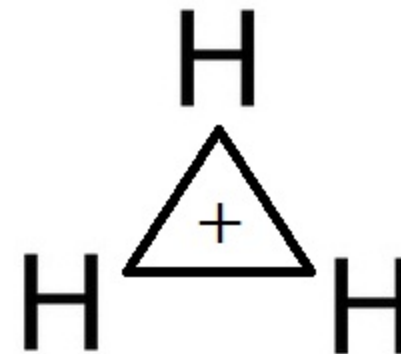
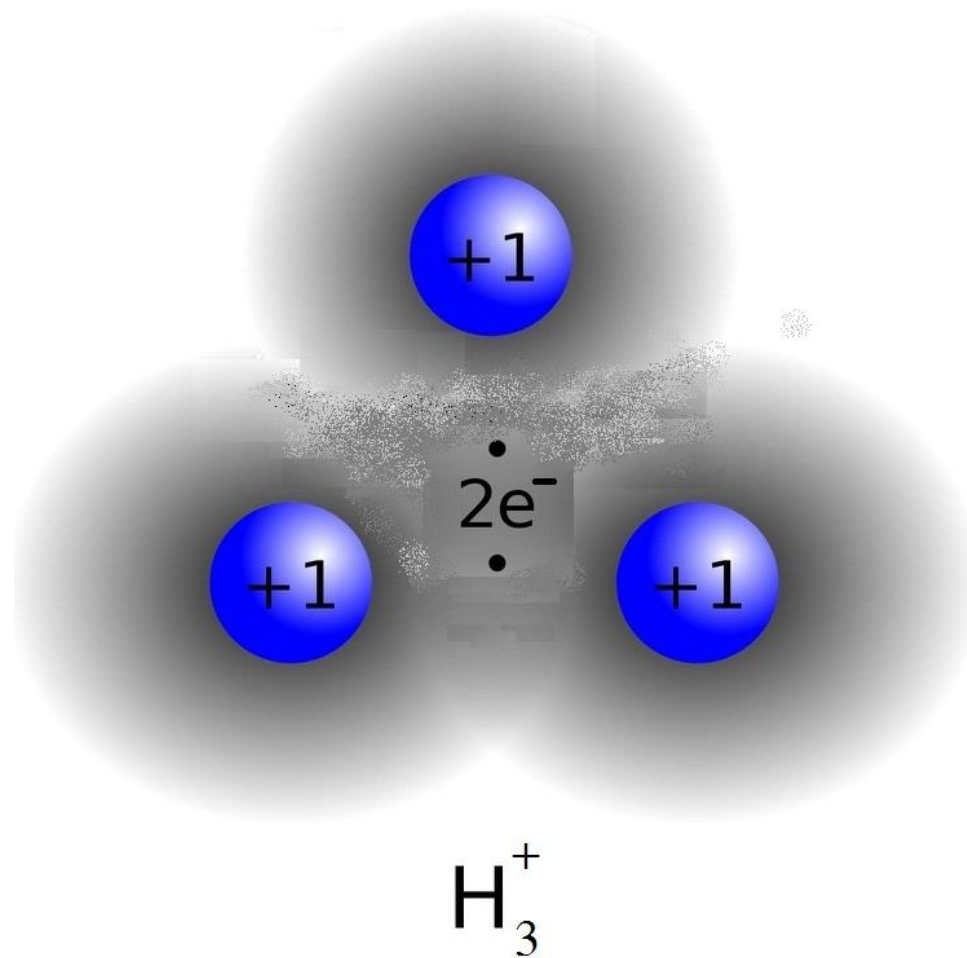
# H<sub>2</sub> ionizációja



# $H_3^+$ keletkezése



# Háromcentrumú kötés



# $H_3^+$ felfedezése

- J. J. Thomson (1911)
- $H_2$  gázkisülési cső + Tömegspektrométer



# $H_3^+$ felfedezése

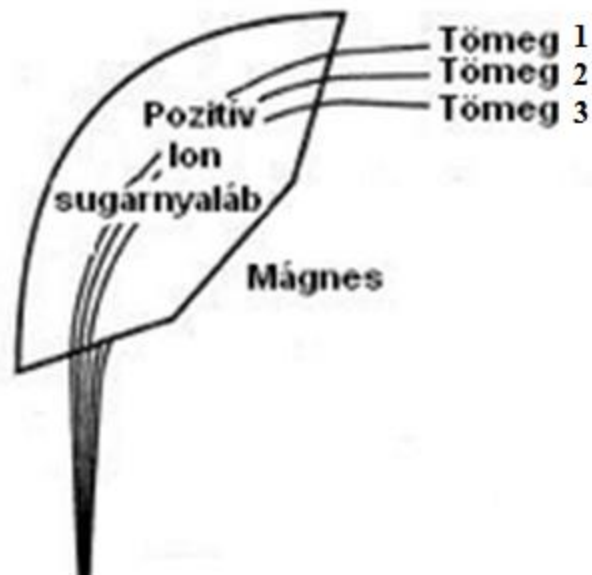
- J. J. Thomson (1911)
- $H_2$  gázkisülési cső + Tömegspektrométer





# $H_3^+$ felfedezése

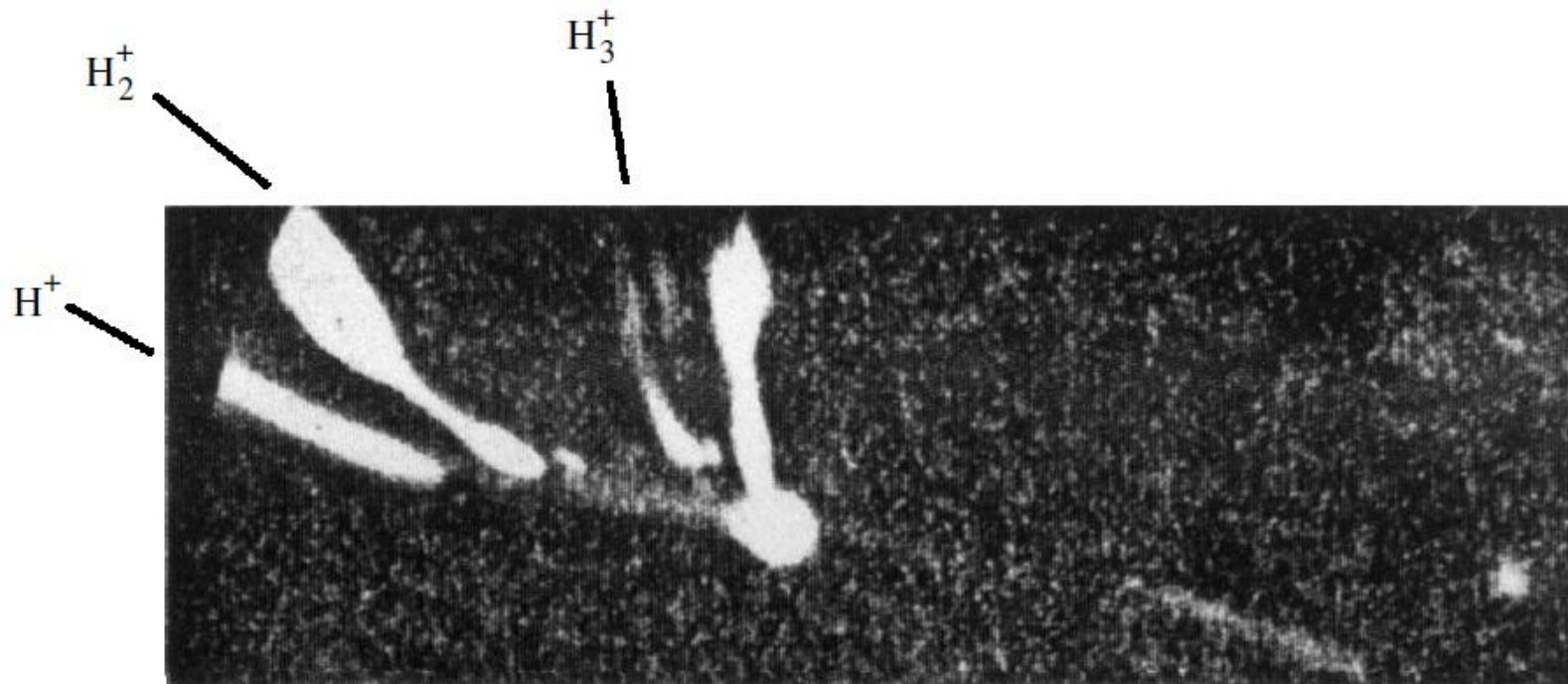
- J. J. Thomson (1911)
- $H_2$  gázkisülési cső + Tömegspektrométer



Kimutatás

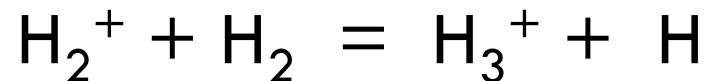
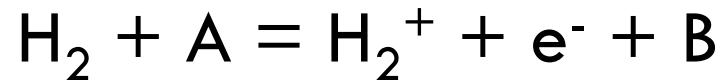
Ion forrás

# A $H_3^+$ első detektálása

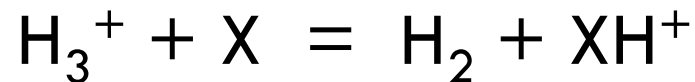


# $H_3^+$ keletkezése és főbb reakciója

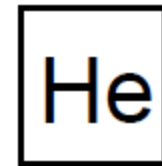
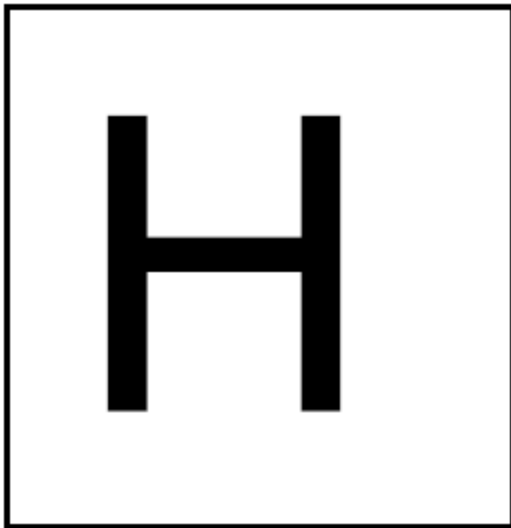
## □ Keletkezés:



## □ Jellemző reakciója (erős sav):



# Csillagászok periodusos rendszere



·  
Mg

·  
Fe

■  
C

·  
N

■  
O

·  
Si

·  
S

·  
Ne

·  
Ar

# Tehát:

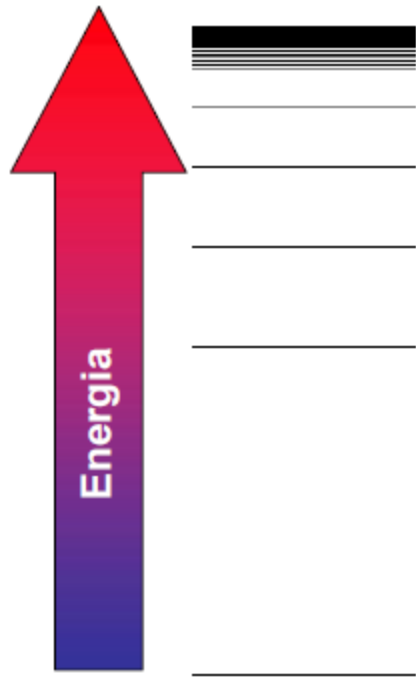
---

- Szeretnénk vizsgálni  $\text{H}_3^+$  molekulát az űrben... nade hogyan tegyük ezt?

**Spektroszkópiával**

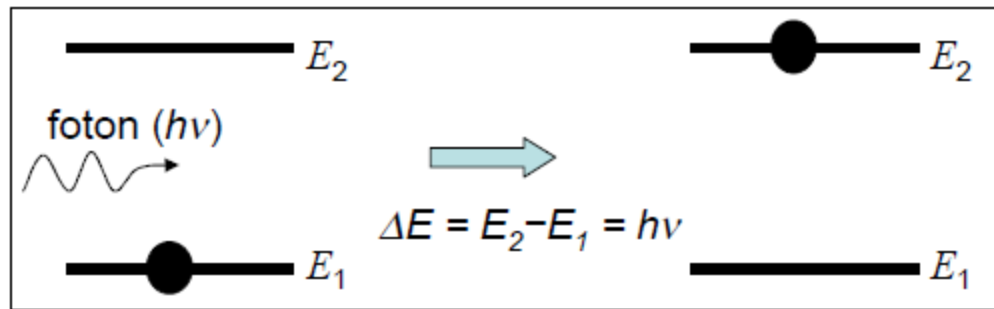
# Spektroszkópia áttekintése

**KVANTUMMECHANIKA:**  
Atomok, molekulák energiája

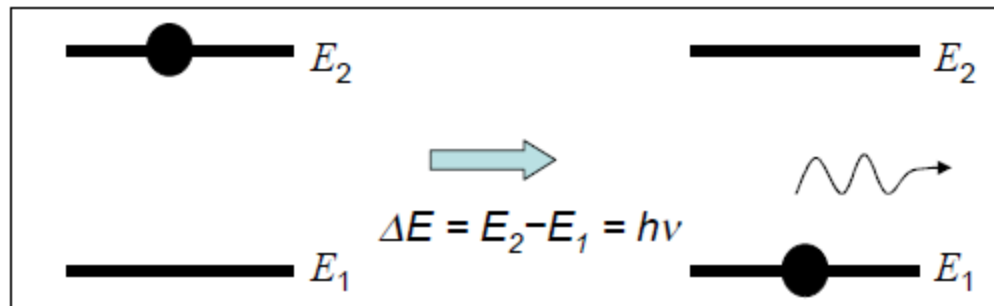


**Nem lehet akármekkora!  
diszkrét energiaszintek**

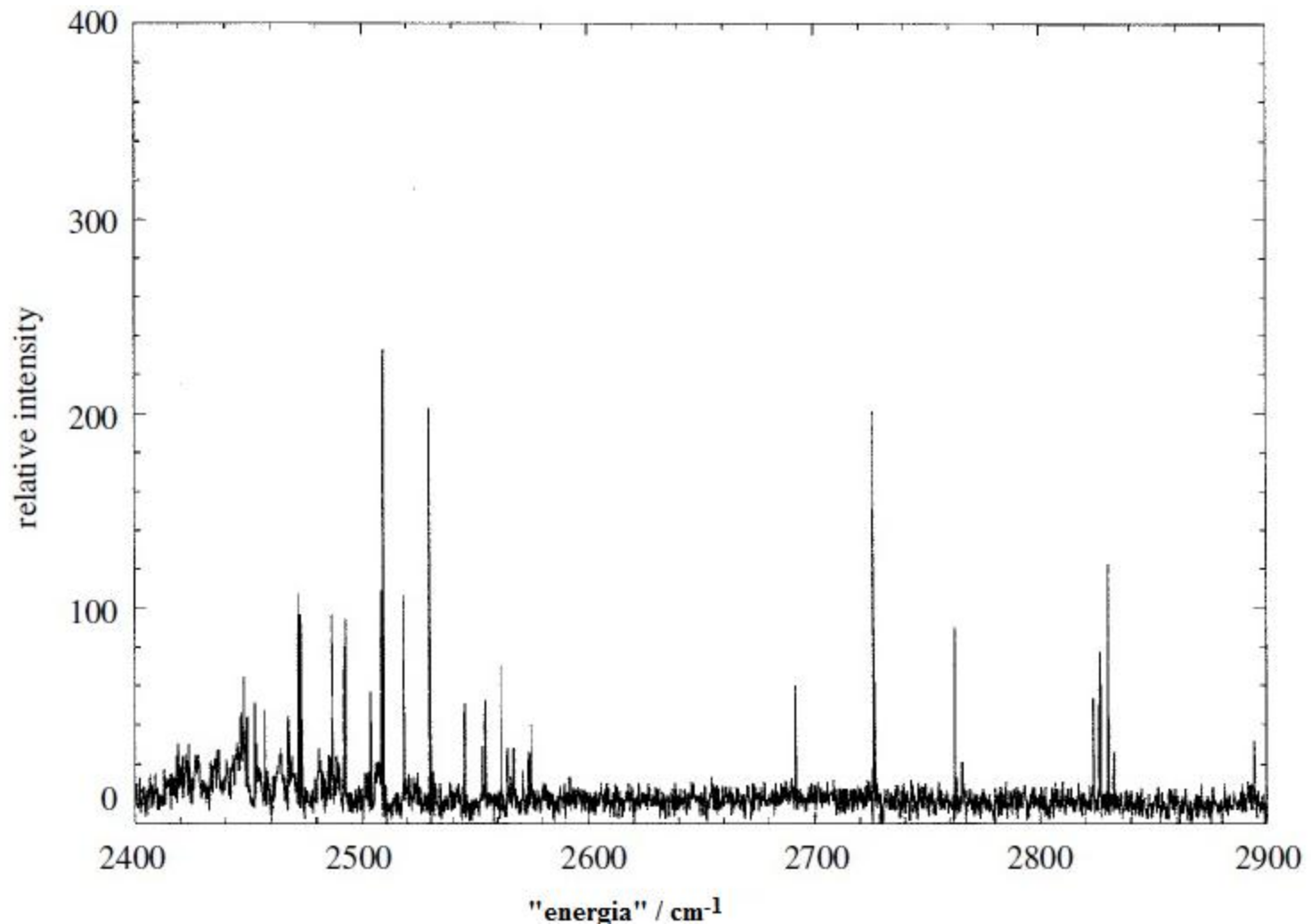
**abszorpció**



**(spontán) emisszió**



# Spektroszkópia áttekintése

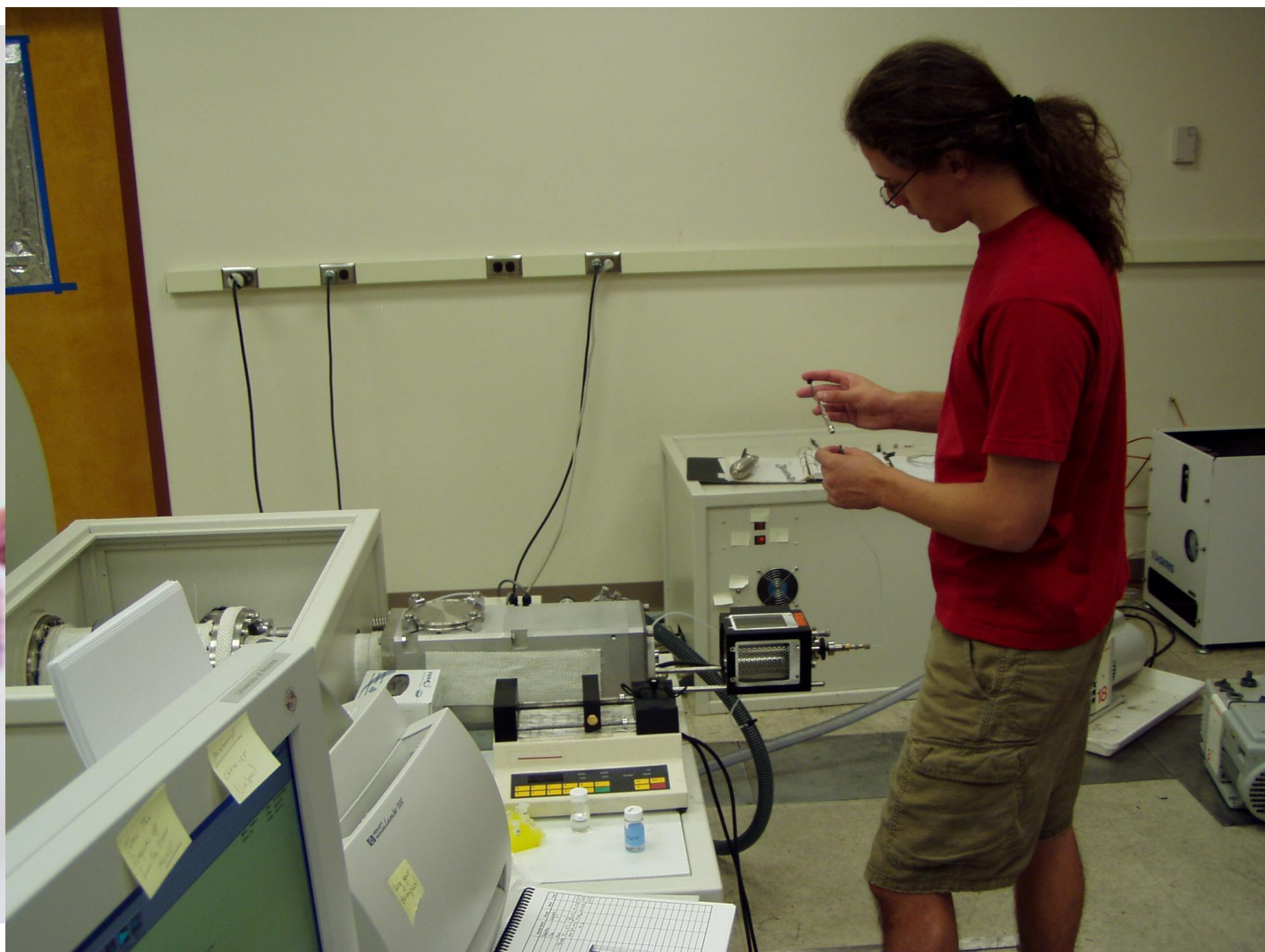


# $H_3^+$ a laborban?

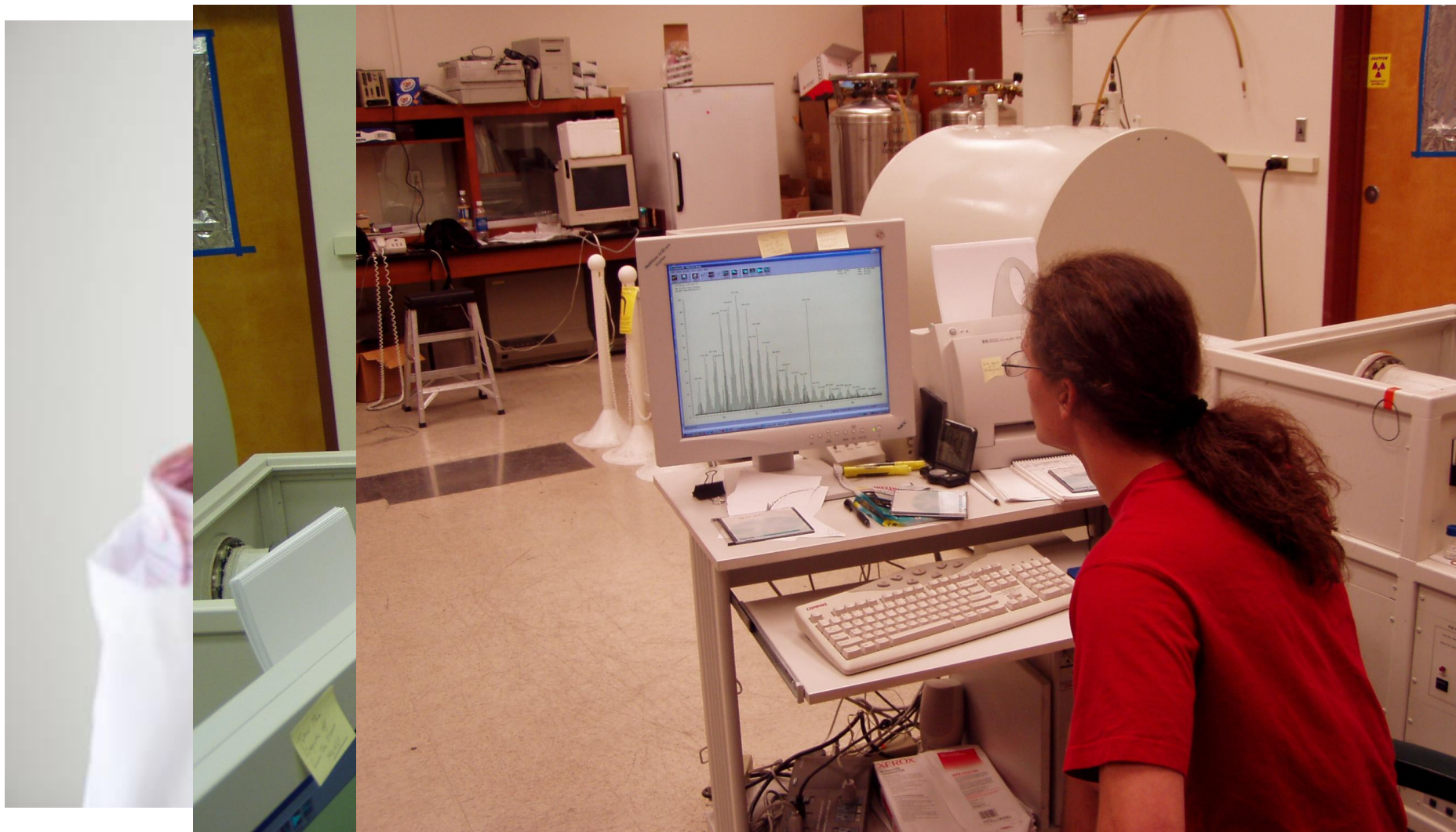




# $H_3^+$ a laborban?



# H<sub>3</sub><sup>+</sup> a laborban?

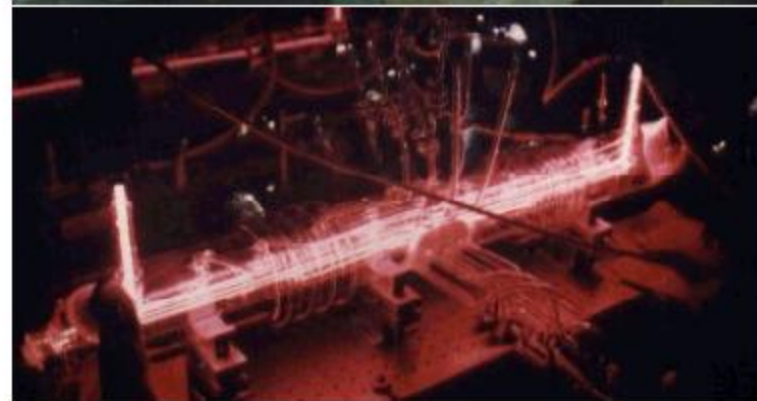
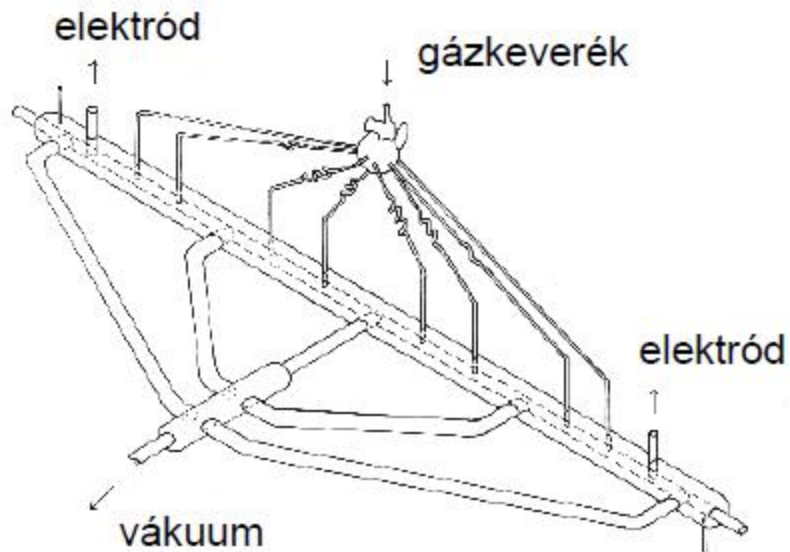




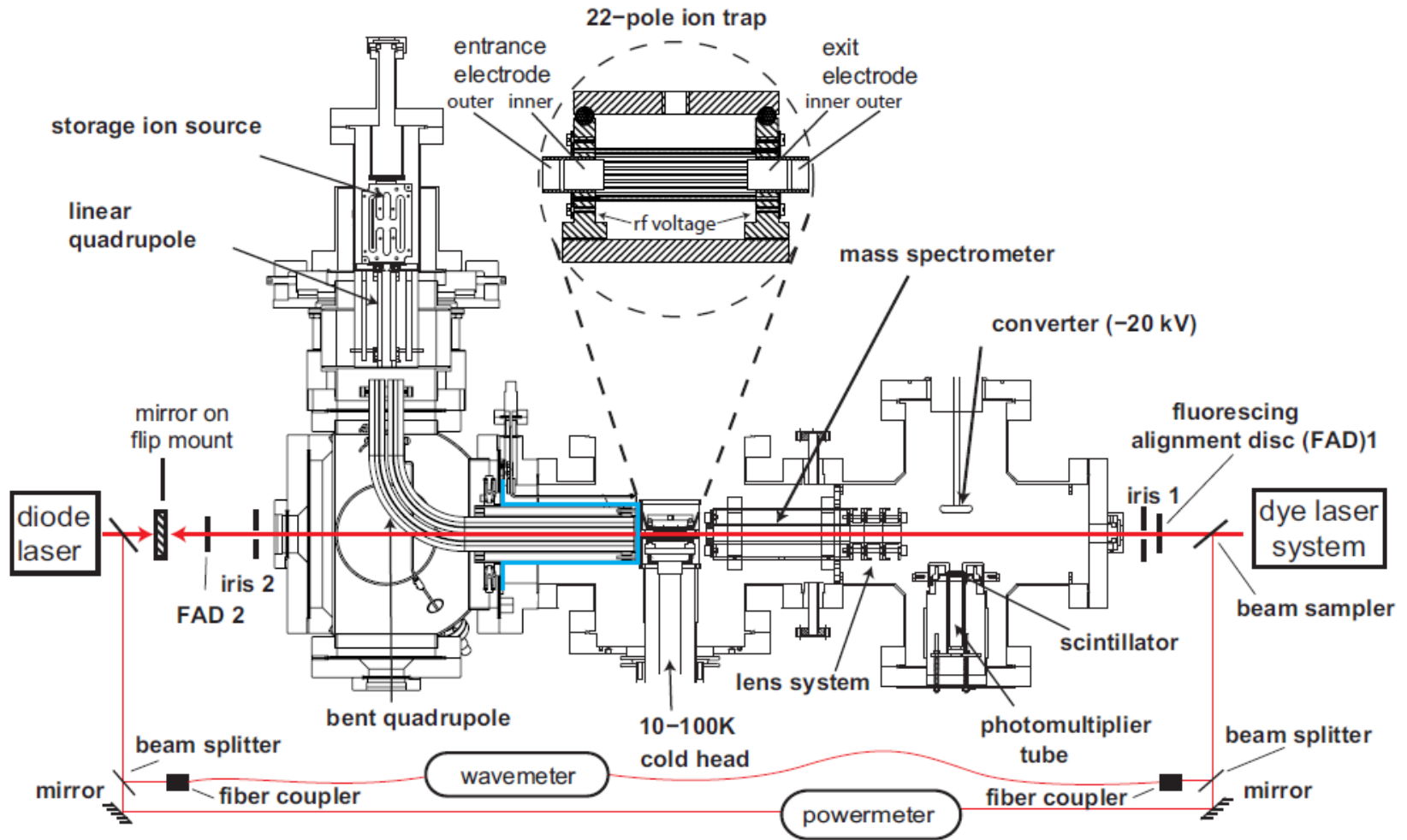
H<sub>3</sub><sup>+</sup> a laborban?



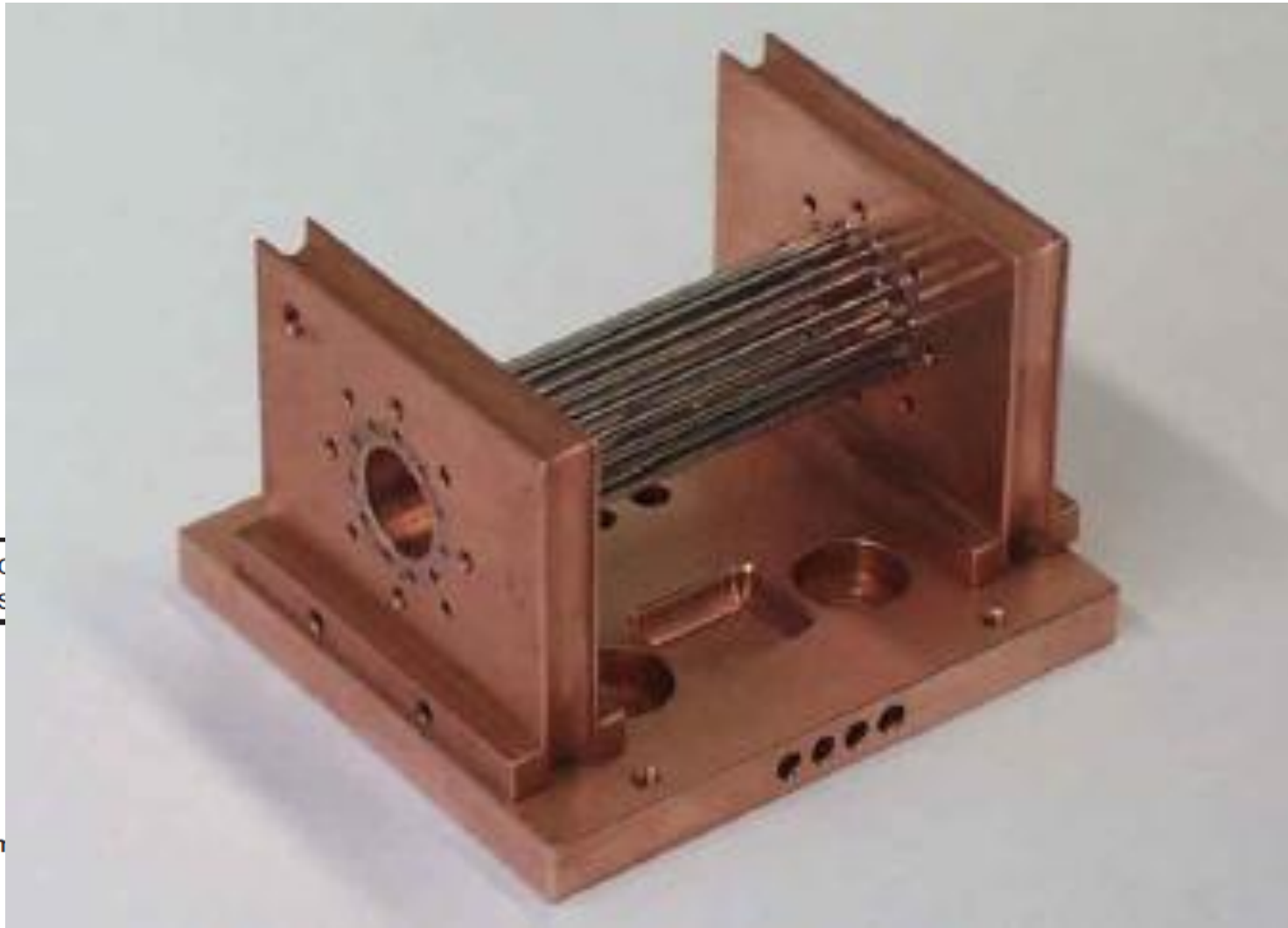
# $H_3^+$ a laborban? Oka (1980)



# $H_3^+$ a laborban? (2011)



# $H_3^+$ a laborban? (2011)



dic  
las

n

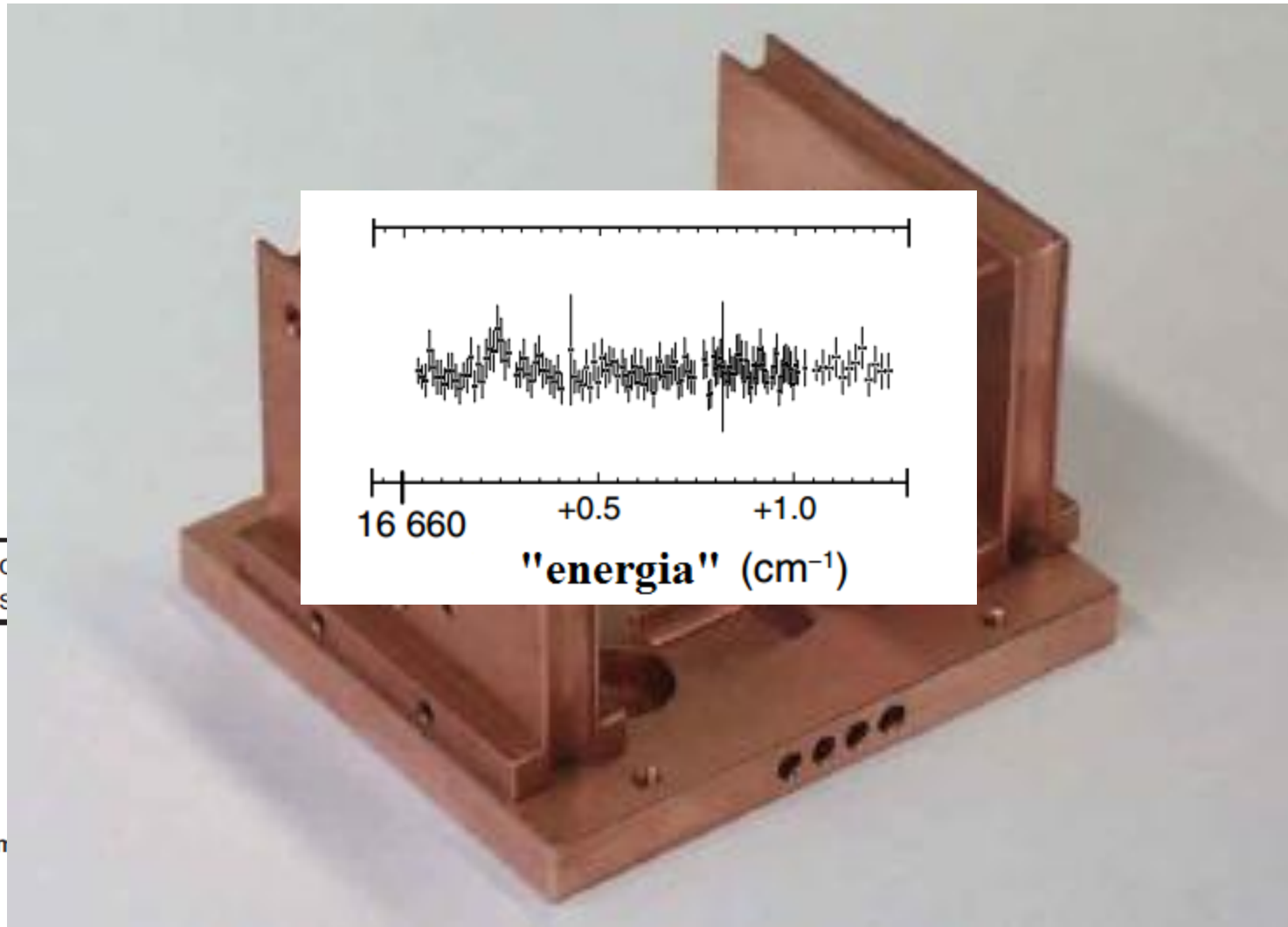
FAD)1

laser  
stem

sampler

plitter

# $\text{H}_3^+$ a laborban? (2011)



dic  
las

FAD)1

laser  
stem

sampler

plitter

n

# $H_3^+$ elméleti számolásokról

$$\hat{H}\psi = E\psi$$



# $H_3^+$ elméleti számolásokról

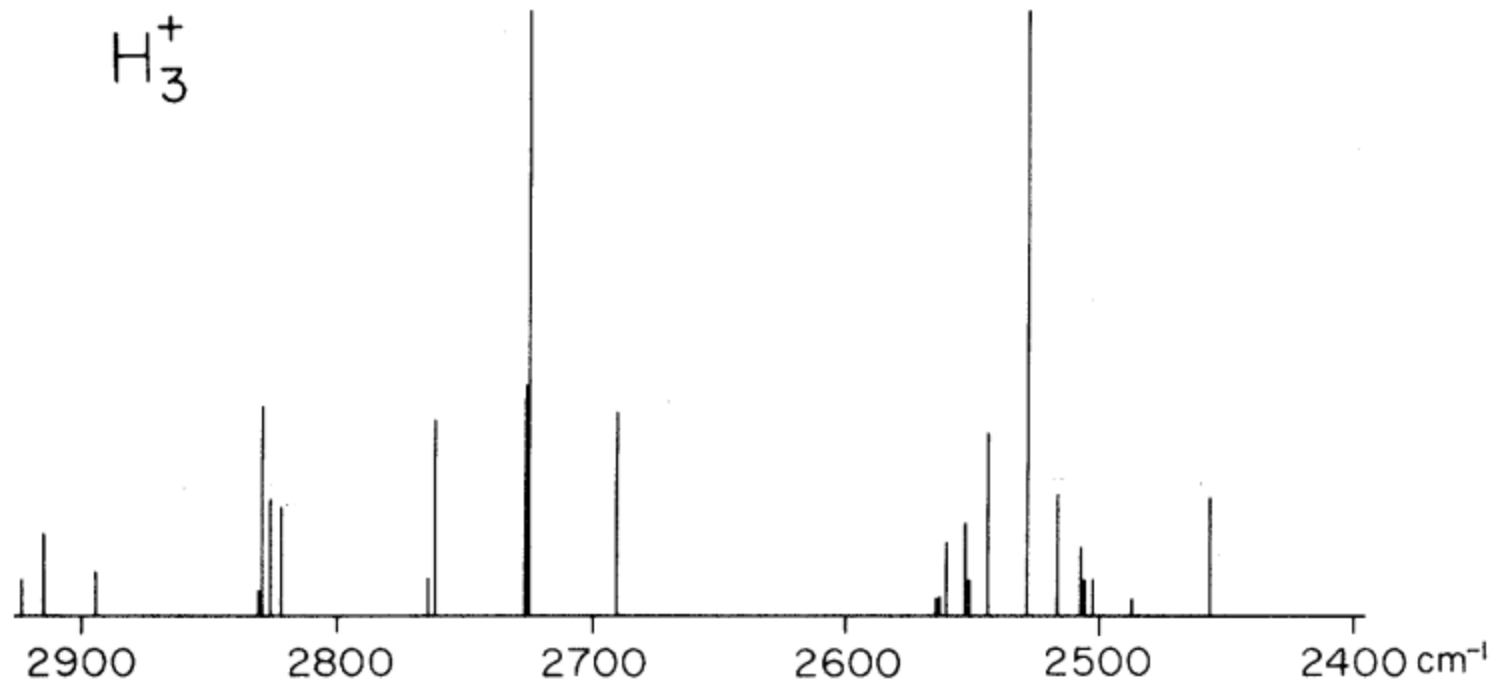
$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} - \frac{1}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial R_2^2} - \left( \frac{1}{2\mu_1 R_1^2} + \frac{1}{2\mu_2 R_2^2} \right) \left( \frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} + \cot \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} - \frac{\hat{j}_z^2}{\sin^2 \Theta} \right) + \frac{1}{2\mu_1 R_1^2} \left( \hat{J}^2 - 2\hat{J}_z \hat{j}_z - \hat{J}_+ \hat{j}_- - \hat{J}_- \hat{j}_+ \right) + \hat{V}(R_1, R_2, \Theta).$$

$$\psi \in \text{Span} \left[ \left\{ \chi_{n_1}(R_1) \chi_{n_2}(R_2) P_l^K(\cos \Theta) C_{MK}^{Jp}(\phi, \chi, \psi) \right\}_{n_1=1, n_2=1, K=p, l=K}^{N_1, N_2, J, K+N_L-1} \right]$$

$$\begin{aligned}
(\mathbf{H}_{\text{rovib}})_{Kn_1n_2l,K'n_1'n_2'l'} &= \delta_{K,K'}\delta_{n_2,n_2'}\delta_{l,l'}(\mathbf{K}_1^{N_1\times N_1})_{n_1,n_1'} + \delta_{n_1,n_1'}\delta_{l,l'}(\mathbf{K}_2^{N_2\times N_2})_{n_2,n_2'} + \\
&+ \delta_{K,K'}\delta_{n_2,n_2'}\left(\mathbf{R}_1^{N_1\times N_1}\right)_{n_1,n_1'}\left(\mathbf{K}_\Theta^{N_L\times N_L}\right)_{l,l'} + \delta_{K,K'}\delta_{n_1,n_1'}\left(\mathbf{R}_2^{N_2\times N_2}\right)_{n_2,n_2'}\left(\mathbf{K}_\Theta^{N_L\times N_L}\right)_{l,l'} + \\
&+ \delta_{K,K'-1}\delta_{n_2,n_2'}\left(\mathbf{R}_1^{N_1\times N_1}\right)_{n_1,n_1'}\left(\mathbf{B}_K^+\right)_{l,l'} + \delta_{K,K'+1}\delta_{n_2,n_2'}\left(\mathbf{R}_1^{N_1\times N_1}\right)_{n_1,n_1'}\left(\mathbf{B}_K^-\right)_{l,l'} + \\
&+ \delta_{K,K'}\delta_{n_2,n_2'}\delta_{l,l'}\left(\tilde{\mathbf{R}}_1^{K,N_1\times N_1}\right)_{n_1,n_1'} + \delta_{K,K'}\left(\mathbf{V}_{\text{rovib}}\right)_{n_1n_2l,n_1'n_2'l'} = \\
&= \delta_{K,K'}\delta_{n_2,n_2'}\delta_{l,l'}(\mathbf{K}_1^{N_1\times N_1})_{n_1,n_1'} + \delta_{n_1,n_1'}\delta_{l,l'}(\mathbf{K}_2^{N_2\times N_2})_{n_2,n_2'} + \\
&+ \delta_{K,K'}\delta_{n_2,n_2'}\delta_{l,l'}(l+K)(l+K-1)\left(\mathbf{R}_1^{N_1\times N_1}\right)_{n_1,n_1'} + \\
&+ \delta_{K,K'}\delta_{n_1,n_1'}\delta_{l,l'}(l+K)(l+K-1)\left(\mathbf{R}_2^{N_2\times N_2}\right)_{n_2,n_2'} - \\
&- \delta_{K,K'-1}\delta_{n_2,n_2'}\delta_{l,l'+1}\left(1+\delta_{K,0}+\delta_{K',0}\right)^{1/2}\Lambda_{JK}^+\Lambda_{lK}^+\left(\mathbf{R}_1^{N_1\times N_1}\right)_{n_1,n_1'} - \\
&- \delta_{K,K'+1}\delta_{n_2,n_2'}\delta_{l,l'-1}\left(1+\delta_{K,0}+\delta_{K',0}\right)^{1/2}\Lambda_{JK}^-\Lambda_{lK}^-\left(\mathbf{R}_1^{N_1\times N_1}\right)_{n_1,n_1'} + \\
&+ \delta_{K,K'}\delta_{n_2,n_2'}\delta_{l,l'}\left[J(J+1)-2K^2\right]\left(\mathbf{R}_1^{N_1\times N_1}\right)_{n_1,n_1'} + \\
&+ \delta_{K,K'}\delta_{n_1,n_1'}\delta_{n_2,n_2'}\left\langle P_l^K(\cos\Theta)\left|V(q_{n_1},q_{n_2},\cos\Theta)\right|P_{l'}^{K'}(\cos\Theta)\right\rangle
\end{aligned}$$

# $H_3^+$ elméleti számolásokból

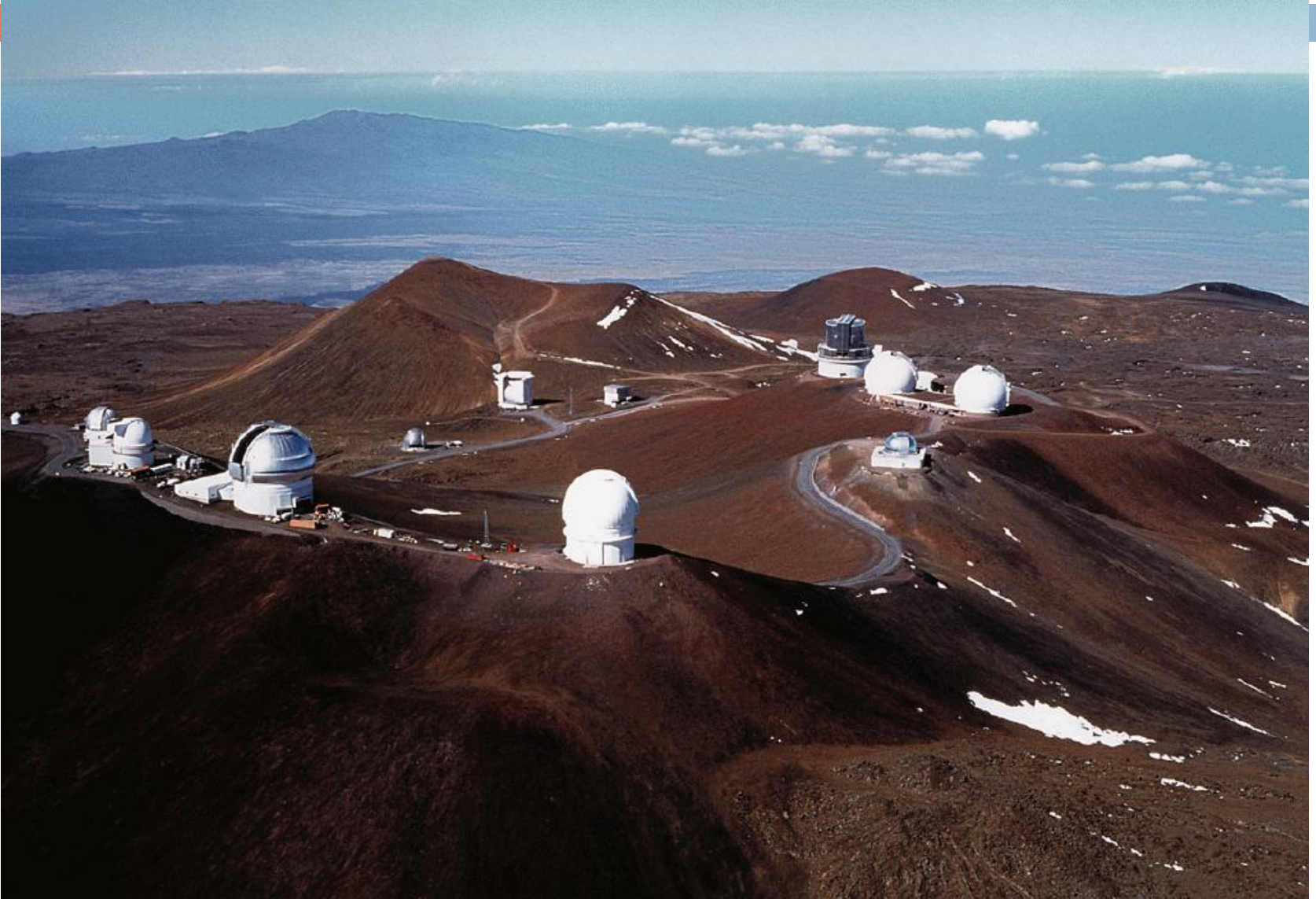


# Tehát:

---

- Van kísérleti és elméleti  $H_3^+$  színképünk, most nézzük mit látunk az űrben...

# Földi teleszkópok



# „Repülő teleszkópok”

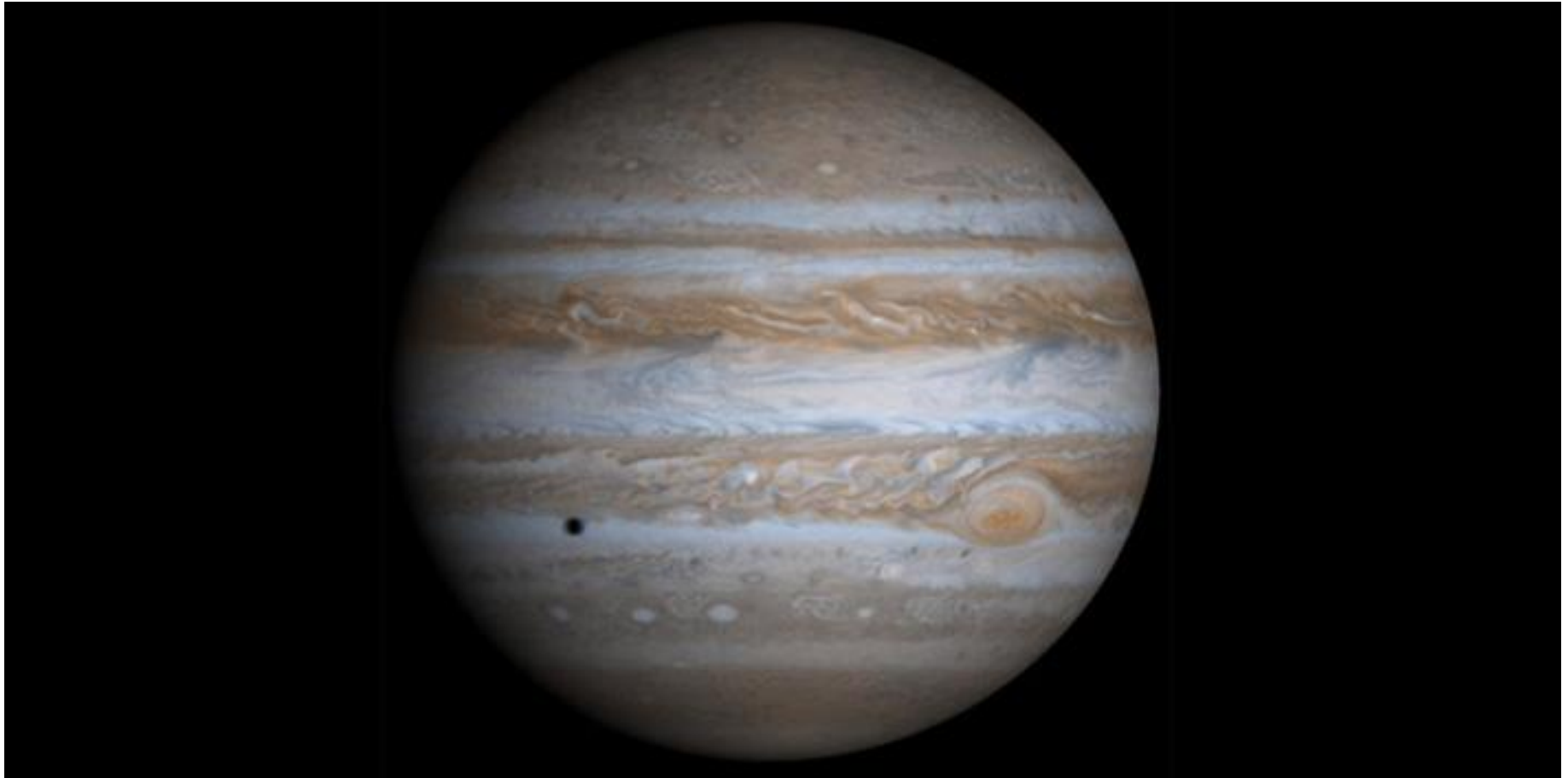




# Műholdak

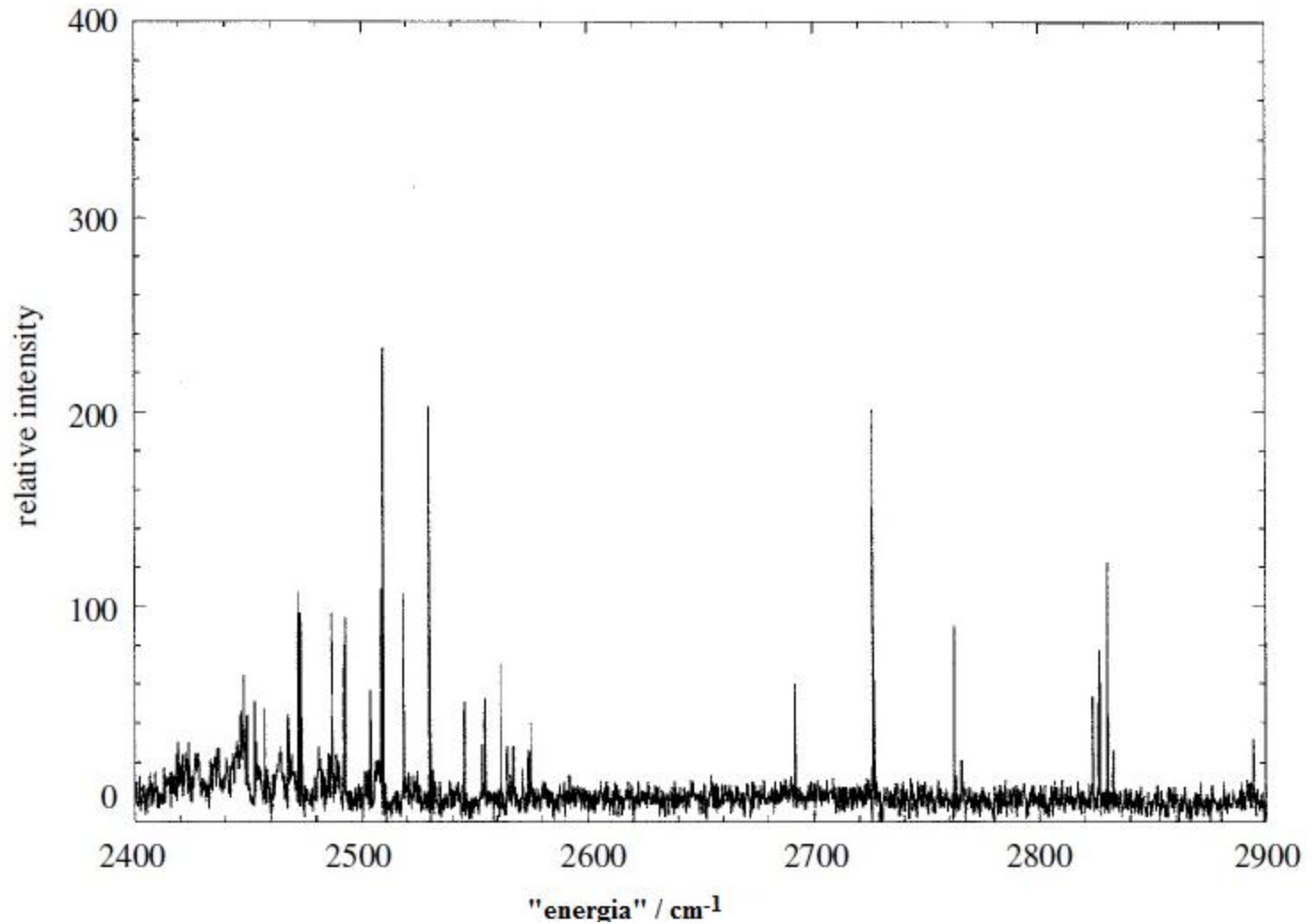


# $\text{H}_3^+$ a Jupiteren (1988)

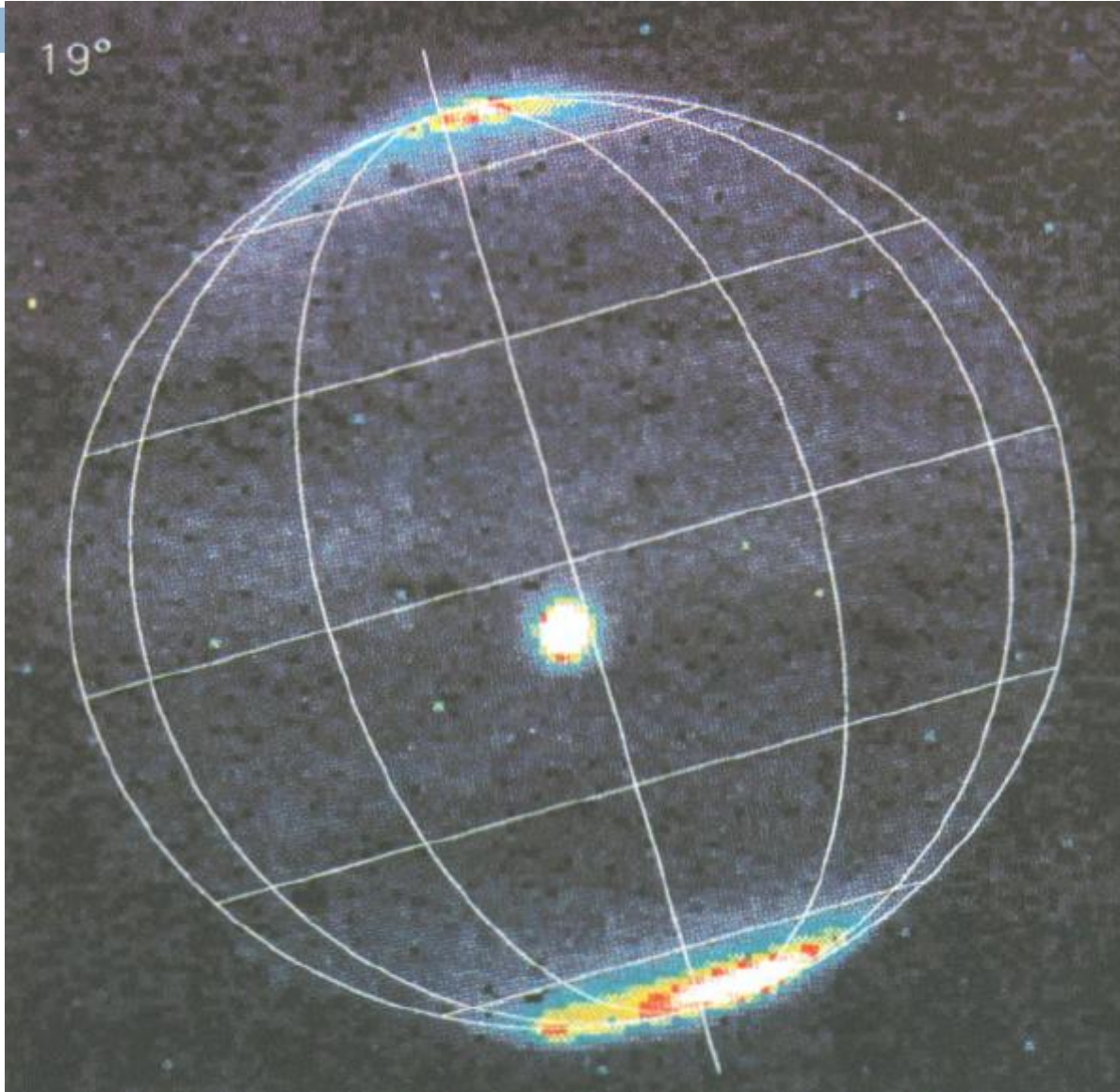




# $\text{H}_3^+$ a Jupiteren



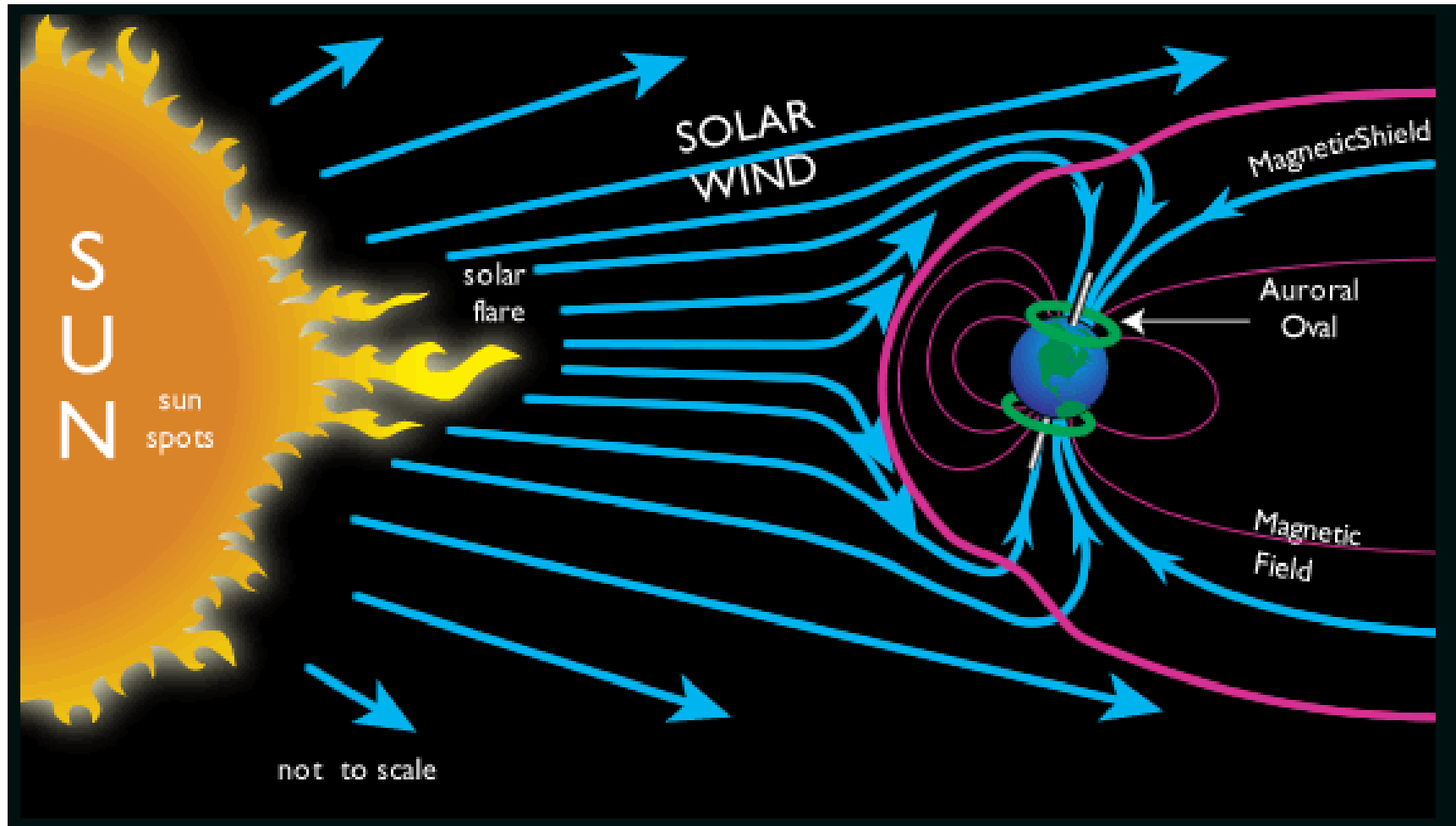
# $\text{H}_3^+$ a Jupiteren (1988)



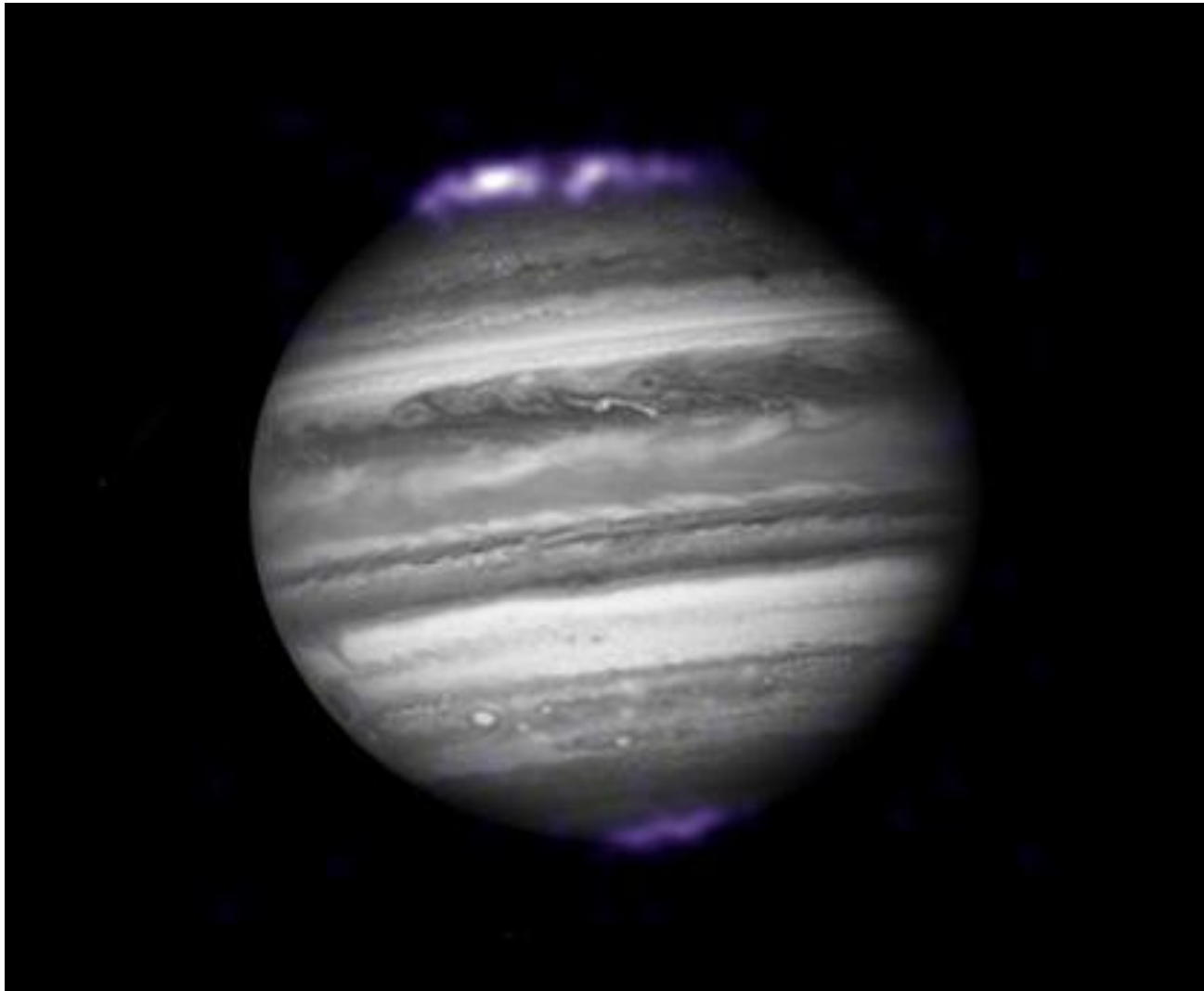
# $\text{H}_3^+$ a Jupiteren



# $H_3^+$ a Jupiteren



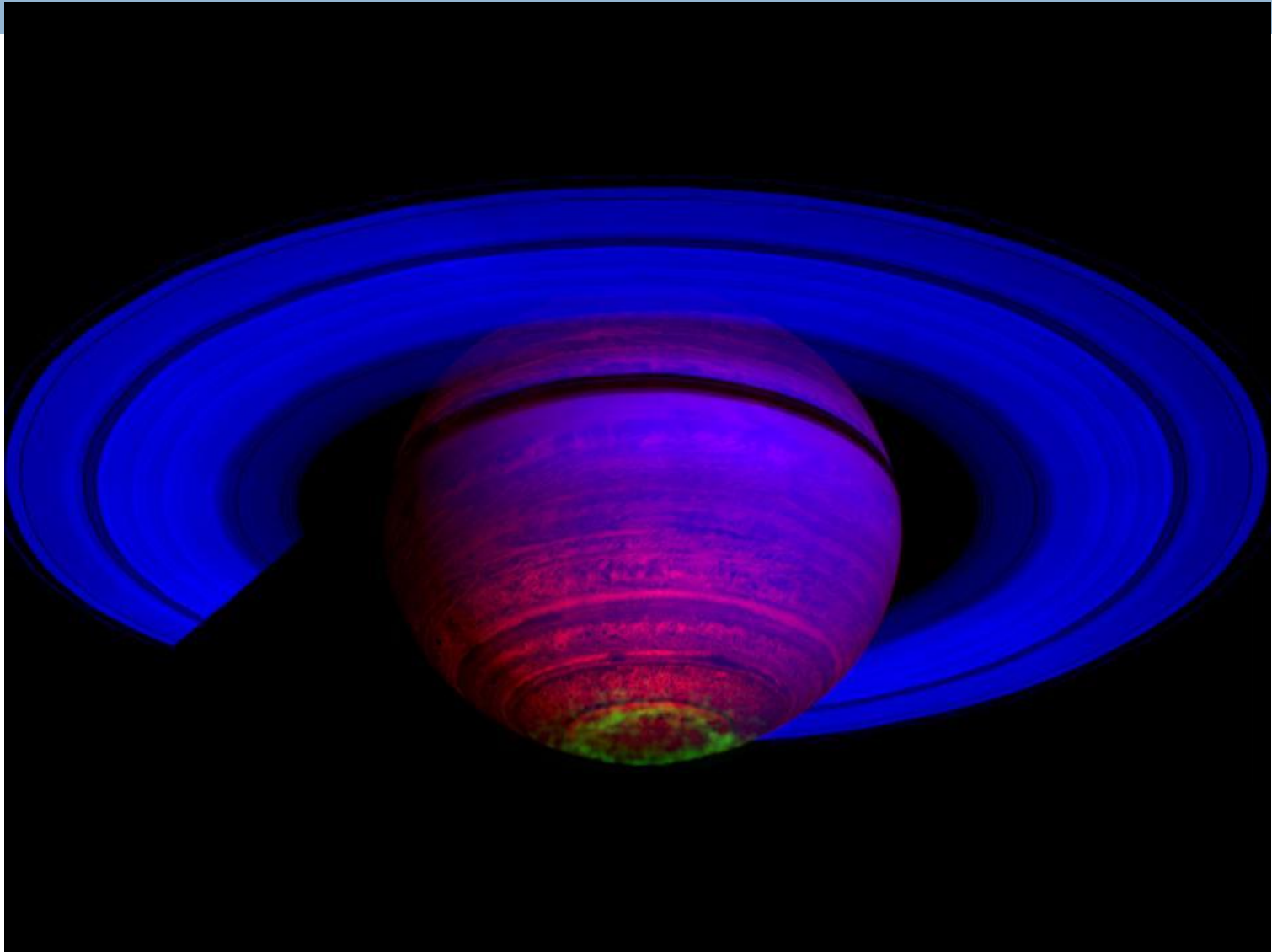
# Jupiter sarki fénye (Röntgen-tartomány)



# $\text{H}_3^+$ a szaturnuszon

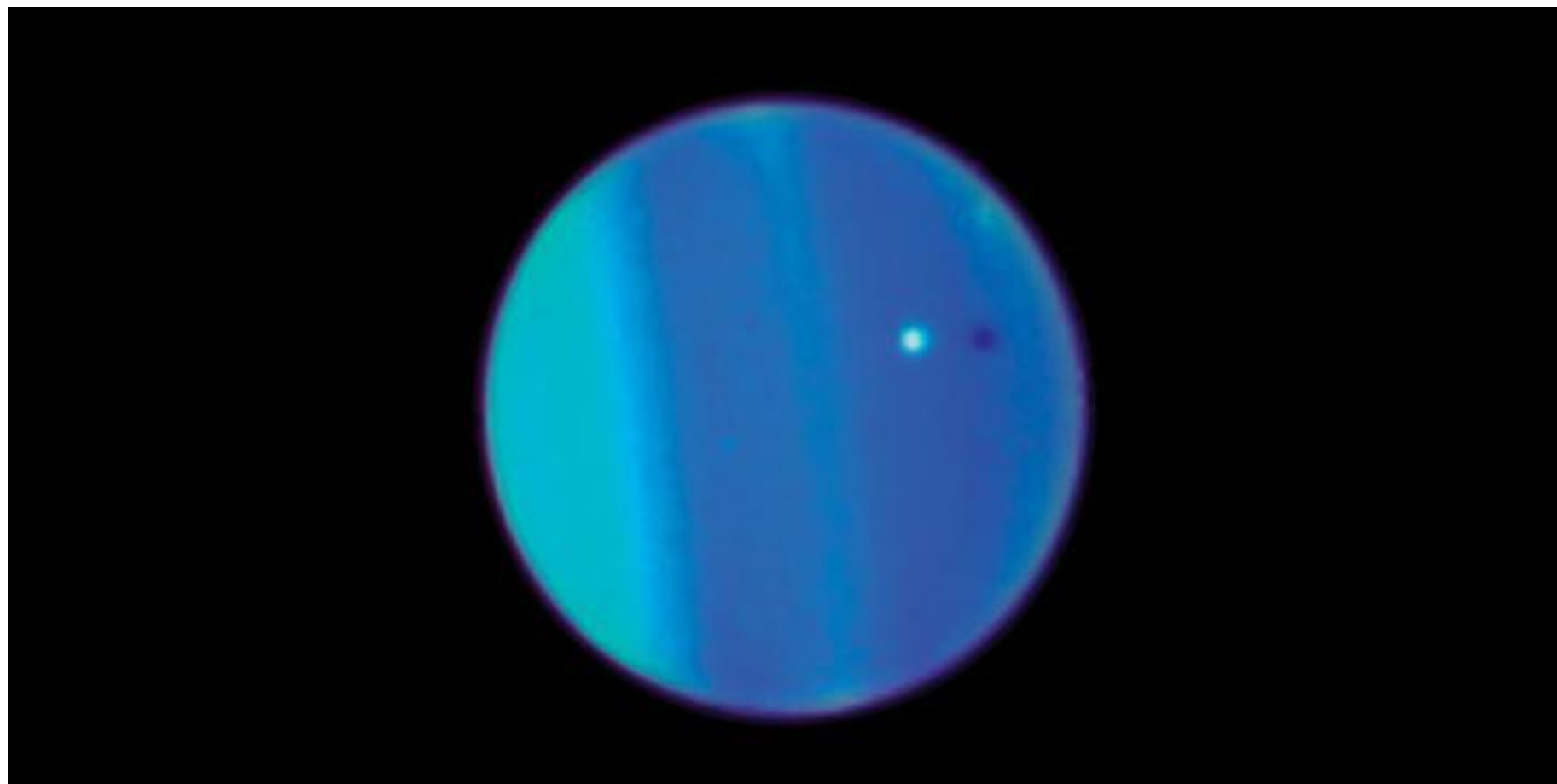


# Szaturnusz sarki fénye (IR tartomány)



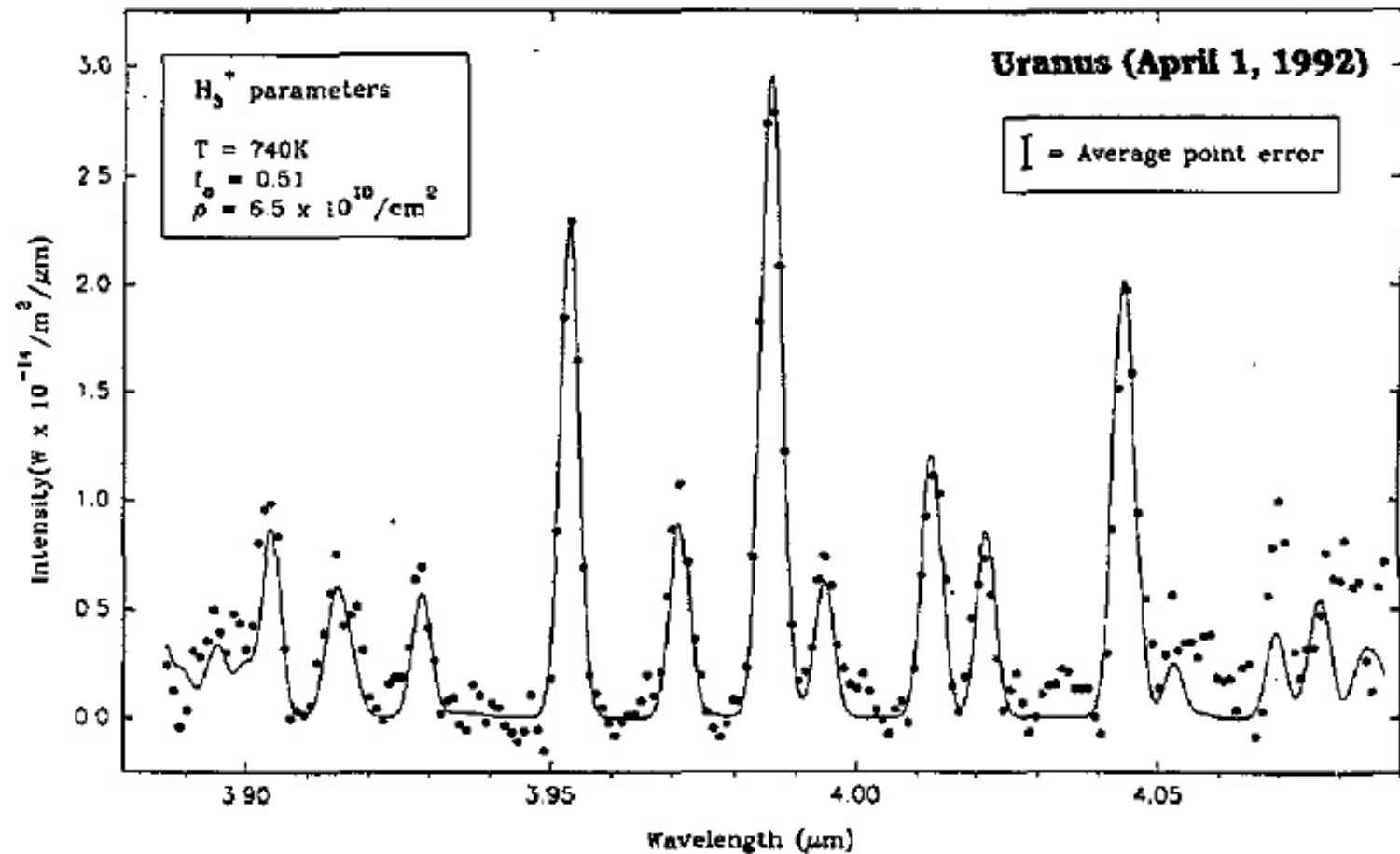


# $H_3^+$ az uránuszon



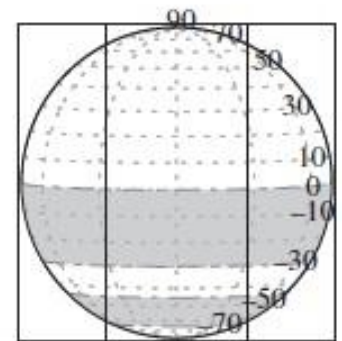
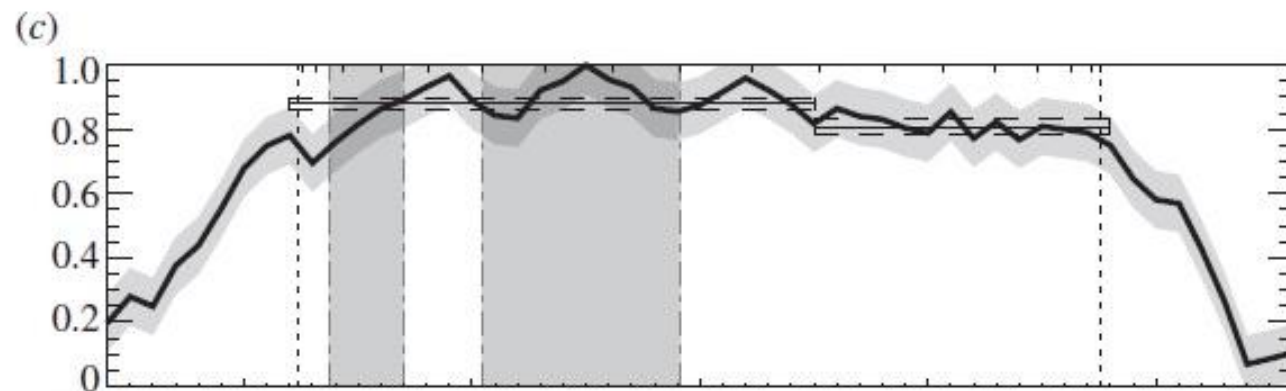
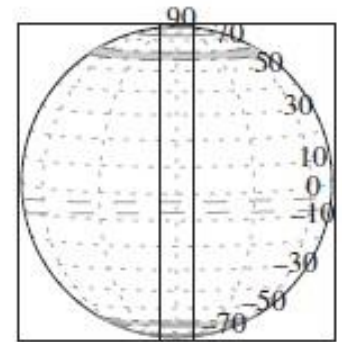
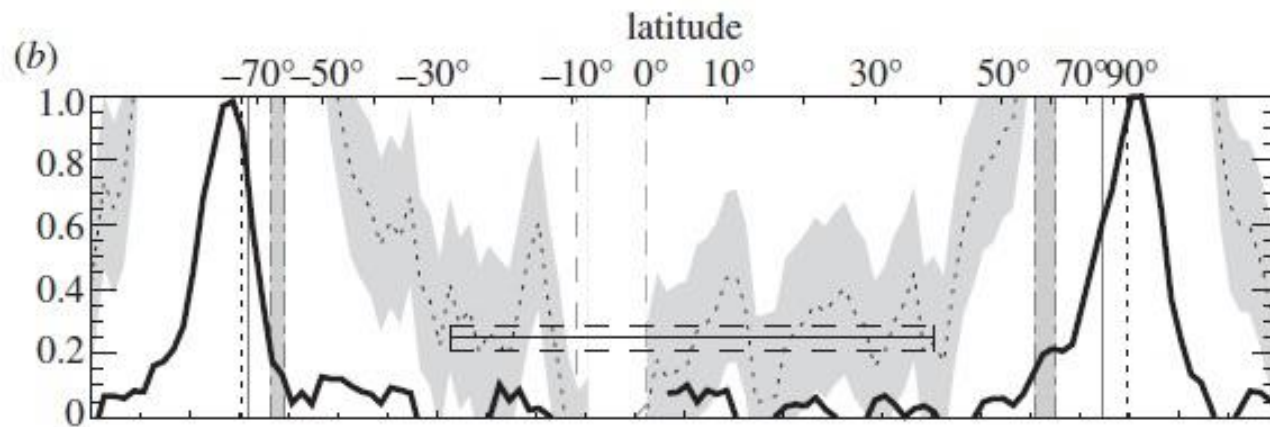
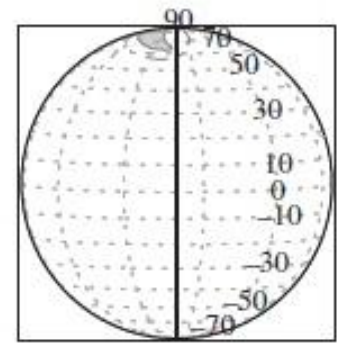
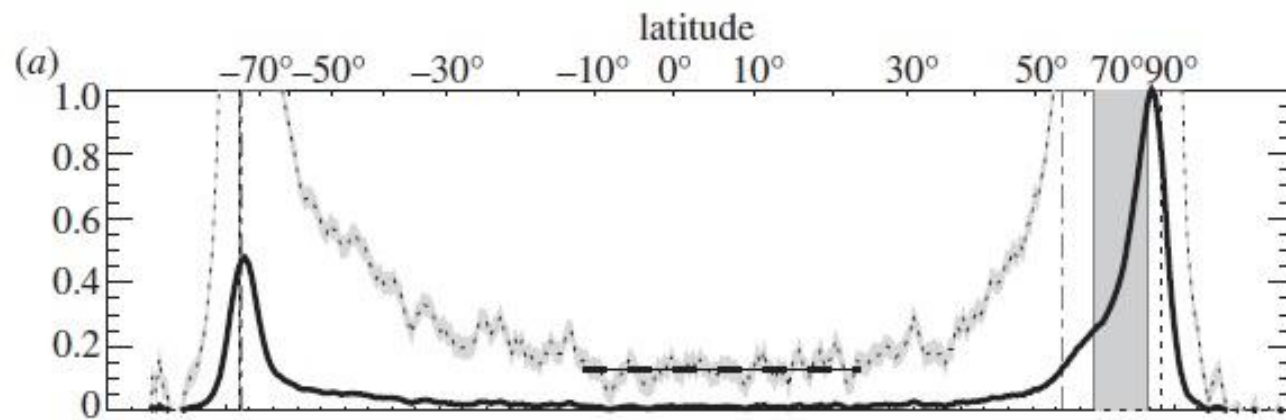


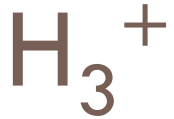
# $H_3^+$ az uránuszon



# Uránusz sarki fénye (UV)







- Jupteren:

$H_3^+$  képződés „sarki fény” kapcsán (+ UV ionizáció révén)

- Szaturnusz:

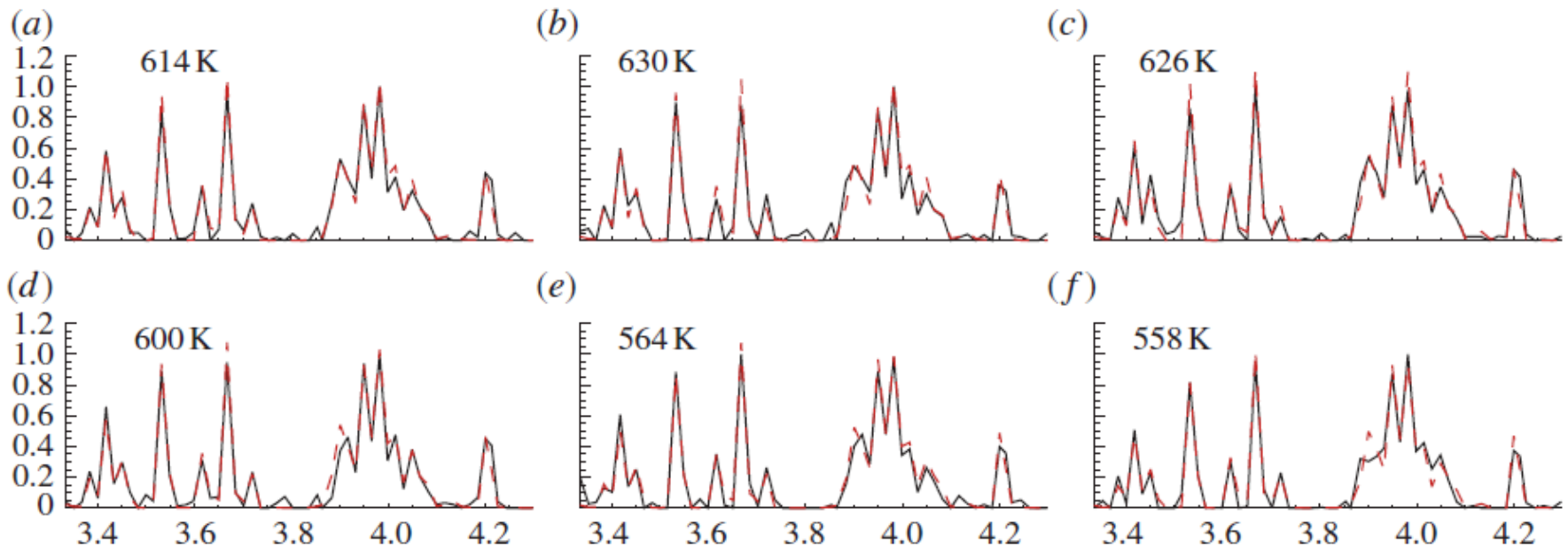
$H_3^+$  képződés „sarki fény” kapcsán (+ UV ionizáció révén)

- Uránusz:

$H_3^+$  emisszió főleg UV inoizációból, sarkifény kis szerepet játszik

# Mire jó, hogy látjuk a $\text{H}_3^+$ -t?

- Léggör változásainak követése, pl. felső légkör hőmérsékletének mérése időben



# $\text{H}_3^+$ a csillagközi térben



Tarantella köd

**Diffúz felhő**

**$T \sim 50-100$  K**

**$1-100$  db molekula / $\text{cm}^{-3}$**



Orion köd

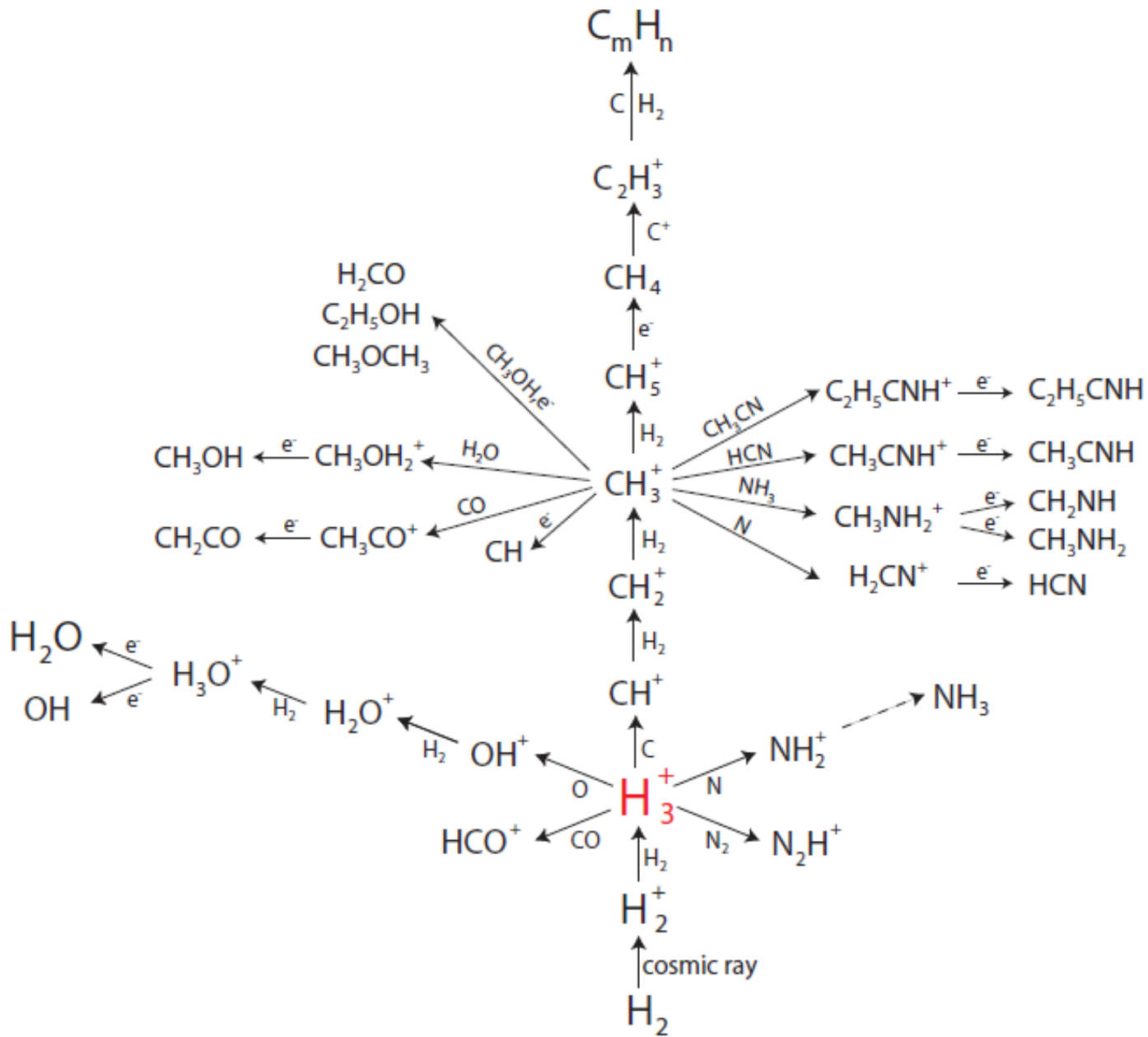
**Molekulafelhő**

**$T \sim 10$  K**

**$>10^3$  db molekula / $\text{cm}^{-3}$**

# $\text{H}_3^+$ a csillagközi térben

- Detektálás: SN1 987A szupernova (1992)
- Detektálás molekula felhőben (1996)
- Detektálás diffúz felhőben (1998)





# $\text{H}_3^+$ a csillagközi térben

- Sok-sok-sok egyéb érdekes információ, pl:
  - ▣ Kozmikus sugárzás ionizációs rátája
  - ▣ D / H arány kb.  $1,5 \cdot 10^{-5}$ , de  $\text{H}_2\text{D}^+$  stabilabb mint  $\text{H}_3^+$ , így fel tud dúsulni, és ez alapján  $\text{H}_3^+$ ,  $\text{H}_2\text{D}^+$  és  $\text{D}_2\text{H}^+$  arányából csillagközi ködök kormeghatározása, ebből csillagképződés időskálája
  - ▣  $\text{H}_2 + \text{H}_3^+ = \text{H}_3^+ + \text{H}_2$  leggyakoribb reakció az univerzumban 😊

# Köszönöm a figyelmet!

## □ Források

- Tarczay György – Kémia a csillagok között (2007)
- Phil. Trans. R. Soc. A, **370**, 4991-5000 (2012)
- Phil. Trans. R. Soc. A, **370**, 5200-5212 (2012)
- Phil. Trans. R. Soc. A, **370**, 5213-5224 (2012)
- Phil. Trans. R. Soc. A, **370**, 5186-5199 (2012)
- Phil. Trans. R. Soc. A, **370**, 5130-5141 (2012)
- Phil. Trans. R. Soc. A, **358**, 2523-2534 (2012)
- Phil. Trans. R. Soc. A, **358**, 2363-2369 (2012)
- Rep. Prog. Phys, **58**, 421 (1995)
- Max. H. Berg – PhD disszertáció, Heidelberg (2011)
- <http://www.3bscientific.hu>
- Wikipedia
- [www.nasa.gov](http://www.nasa.gov)