

# Erken Dönem Güneş Diski Karbon Denge ve Denge Dışı Kimyası

Pekmezci, G.S.<sup>1</sup>★<sup>ORCID</sup>, Lunine, J.I.<sup>2</sup><sup>ORCID</sup>, Mousis, O.<sup>3</sup><sup>ORCID</sup>

<sup>1</sup>Küçük Sanayi, Nilüfer, Bursa

<sup>2</sup>Cornell Center for Astrophysics and Planetary Sciences Ithaca, NY, ABD

<sup>3</sup>Aix Marseille Université, CNRS, LAM, Marseille, Fransa

Accepted: December 22, 2022. Revised: July 29, 2022. Received: June 21, 2022.

## Özet

Bu çalışmada öngüneş diskinde gerçekleşen CO – CH<sub>4</sub> dönüşümünün kimyası, önce termokimyasal denge metodu ve ardından denge dışı hesabı ile analiz edilmektedir. Denge yaklaşımıyla diskteki karbon dönüşüm tepkimesinin 100–2000 K sıcaklığı arasındaki değişimi ileri düzey bir kimyasal kod ile hesaplanmış ve sonuçlar Güneş Sistemi'nin dev gezegen atmosferleri için yapılmış ölçüm veya gözlemlerle kıyaslanmıştır. Fakat bu tepkime için diskteki uygun koşullar yalnızca sınırlı bir süre ve sıcaklıkta var olur. Diskin soğumasıyla bu dönüşümün durması beklenir. Dönüşümün sönmesi için sıcaklık aralığı ve öngüneş diski kimyasal kompozisyonu büyük bir kimyasal çeşitlilik ile ayrıntılı olarak hesaplanmıştır. Çalışmanın bulguları beklentiler doğrultusundadır ve literatürdeki benzerlerine kıyasla oldukça detaylıdır.

## Abstract

In this study, the chemistry of the CO – CH<sub>4</sub> transformation in the protosolar disk is analyzed by the thermochemical equilibrium and the non-equilibrium methods. With the equilibrium approach, the variation of the carbon conversion reaction in the disk between 100–2000 K temperature is computed by an advanced chemical code and the results are compared with the measurements or observations made for the giant planet atmospheres of the Solar System. However, since the disk maintains favorable conditions for this reaction only for a limited time and temperature, the transformation is expected to quench over time as the disk cools off. Therefore, the quench temperature range is calculated, and the chemical composition of the protosolar disk is documented in detail with a large pool of chemical species. The findings of the study, in addition to being highly detailed compared to their counterparts in the literature, are also in line with expectations.

**Anahtar Kelimeler:** astrochemistry – cosmochemistry – Solar Disk

## 1 Giriş

Önyıldız disklerinin kinematigi ve fiziği ile özellikle karbon, azot ve oksijen atomları arasındaki türlü bileşikler hakkında yapılan araştırmalar, gezegenlerin ve yaşamın geçişini anlamaya yardımcı olmaktadır (Turrini ve diğ. 2021; Petigura ve Marcy 2011; Semenov ve diğ. 2010). Günümüzde CO, CO<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, HCN, OH, NH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O gibi önemli basit moleküller ve onların soğuk bölgelerdeki buzları hakkında Spitzer gibi uzaydan veya Keck, VLT ve Subaru gibi yerden kızılötesi bölgelerdeki gözlemlerle gezegen oluşturan bazı sistemlerdeki yıldız çevrelerinden veri toplamak mümkündür (Turrini ve diğ. 2021; Walsh ve diğ. 2015, 2014; Semenov ve Wiebe 2011).

Yüksek sıcaklıklarda dengenin korunması koşulu altında, öngüneş diskinin ilk bileşiklerinin, Güneş yaklaşık 1 milyon yaşında ve T-Tauri evresinde olduğunda CO, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, CO<sub>2</sub> ve bazı hidrokarbonlardan oluştuğu düşünülmektedir (Aikawa 2003). Bu temel moleküllerden CO, N<sub>2</sub> ve H<sub>2</sub>O'nun yüksek sıcaklık ve düşük basınçlarda baskın olduğu, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub> ve H<sub>2</sub>O'nun ise düşük sıcaklık ve düşük basınçlarda yoğun olduğu gözlenmektedir (Lewis ve Prinn 1980). Sıcaklık düşük fakat basınç yüksek ise, CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub> ve H<sub>2</sub>O baskın moleküller olacaktır (Lewis ve Prinn 1980). Bu nedenle basınç ve sıcaklık, öngüneş

diskinin farklı bölgelerindeki kimyasal bileşimi belirlemek için anahtar parametrelerdir (Lewis ve Prinn 1980).

Literatürdeki çalışmaların çoğu (örneğin: Semenov ve diğ. 2018; Cyr ve diğ. 1999; Lewis ve diğ. 1979; Lewis 1974) öngüneş diskinin termokimyasal denge yaklaşımıyla ele almıştır. Bununla birlikte, elverişsiz disk koşulları, çok geniş bir alan nedeniyle düşük etkileşim şansı ve tepkimelerin tamamlanması için yetersiz zaman göz önüne alındığında, kimyasal tepkimelerin denge oluşmadan önce sönmüş olması akla daha yakındır. Disklerin sunduğu belirli dinamik ortam ve belli tepkimelerin meydana geldiği yerel ortamlar, zamanla soğuduğu ve dağıldığı için, aynı şartlarda çok uzun süre korunamaz (Fegley 2000; Aikawa ve diğ. 1999). Benzer şekilde, her kimyasal tepkimenin hızı, sıcaklıkla ilişkili olan başka bir sınırlayıcı faktördür (Fegley ve Lodders 1994; Fegley ve Prinn 1985; Lewis ve Prinn 1980; Moses ve diğ. 2011). Buna rağmen literatürde Prinn ve Fegley (1981), Lewis ve Prinn (1980) ile Studier ve diğ. (1968) gibi denge dışı hesaplamalarla ilgili sadece birkaç klasik çalışma bulunurken, Moses ve diğ. (2013) gibi her iki yaklaşımı birleştiren çalışma sayısı azdır.

Denge dışı bileşenlerinin bolluğu, disklerin termal özelliklerinden ve evriminden önemli bir şekilde etkilenir ve basınçtaki artışlar, kinetik tepkimelerin enerji engellerini aşmasına da yardımcı olabilir (Fegley ve Lodders 1994; Fegley ve Prinn 1985; Lewis ve Prinn 1980). Böylece yüksek sıcaklık

\* gspekmezci@roma2.infn.it

ile basınç koşulları altında, kimyasal tepkimeler hem ileri hem de geri yönde serbestçe sürebilir ve bu da denge ile sonuçlanır (Fegley ve Lodders 1994; Fegley ve Prinn 1985; Lewis ve Prinn 1980; Moses ve diğ. 2011). Çevre soğudukça veya gaz, taşıma yoluyla düşük sıcaklıklı bölgelere doğru sürüklendiğçe, tepkimelerin artık hızlı gerçekleşemez ve enerji bariyerleri önemli hale gelir (Fegley ve Lodders 1994; Fegley ve Prinn 1985; Lewis ve Prinn 1980; Moses ve diğ. 2011). Bu nedenle bazı tepkimelerin belirli bir sıcaklığın altında sönmesi veya donması muhtemeldir ki bu da hiçbir zaman denge ürünlerine veya fazlarına dönüşmeyi başaramayacakları anlamına gelmektedir (Aikawa ve diğ. 1999; Fegley 2000; Lewis 2004).

$t_{\text{disk}}$ 'in tanımı için karakteristik disk karışımı dikkate alınır:  $t_{\text{kimyasal}} < t_{\text{disk}}$  kimyasal dengeye yol açan,  $t_{\text{kimyasal}} > t_{\text{disk}}$  ise dengesizliğe yol açan durum (Fegley 1988, 2000; Fegley ve Prinn 1985; Prinn ve Fegley 1981; Saumon ve diğ. 2000; Visscher ve diğ. 2010) olarak tanımlanmıştır. İki sürenin birbirine yaklaştığı  $t_{\text{kimyasal}} \approx t_{\text{disk}}$  durum ise sönüm sıcaklık bölgesi ( $T_Q$ ) olarak adlandırılır (Bézar ve diğ. 2002; Fegley 1988, 2000; Fegley ve Prinn 1985; Lodders ve Fegley 1999; Prinn ve Fegley 1981; Saumon ve diğ. 2000; Visscher ve diğ. 2010). Sönüm sıcaklığının üzerindeki sönmüş bileşiklerin bolluğu, basitçe o sıcaklık için hesaplanan denge bollukları olarak alınabilir (Moses ve diğ. 2011).

Mothersurjide 'su verme' terimiyle de anılan Legerská ve diğ. (2006) sönüm kinetiği, tepkimelerin gerçekleştiği ortamdaki sıcaklığın zamanla azalmasıyla, tepkime ürünlerinin kinetik olarak erişilemez oldukları şartları inceler. Sönüm kinetiği, moleküllerin bolluğunun, yıldız disklerinin ve gezegen atmosferlerinin karışma dinamiklerinin belirlenmesi için önemli bir kavramsal araçtır (Visscher 2011). İlk olarak Prinn ve Barshay (1977) tarafından Jüpiter'in üst troposferinde tespit edilen beklenmedik CO bolluğuna bir çözüm olarak kullanılmıştır. Günümüzde olumsuz koşullar altında beklenmedik şekilde büyük miktarda bolluğa sahip bileşikler, özellikle de  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$  ve  $\text{HCN}$  gibi önemli bileşikler için temel bir yaklaşım olarak kabul edilmektedir (Moses ve diğ. 2011; Prinn 1993).

Bu çalışmada öngüneş diskinin kimyasal bileşimi ve davranışı önce termokimyasal denge varsayımıyla diskin farklı bölgelerinde bolluk veya önem açısından hangi gazların öne çıkacağı detaylı olarak tartışılacak, akabinde fiziksel kısıtlamalar, kimyasal yetersizlikler ve/veya zaman sınırlaması nedeniyle dengeye ulaşılamayan durumlarda  $\text{CO} - \text{CH}_4$  dönüşümünün dinamiklerine odaklanılarak hesaplanan sönüm sıcaklıkları altında disk kompozisyonu verilecektir.

## 2 Metodoloji

### 2.1 Termokimyasal Denge Modeli

Termokimyasal denge hesapları, disklerin, göktaşlarının ve gezegenlerin kimyasal bileşimi ile ilgili çalışmalarda, geçen yüzyılın ikinci yarısından itibaren sürekli gelişerek ve ilerleyerek kullanılmaktadır (Fegley 2000; Aikawa ve diğ. 1999). Astrofizik çalışmalarında moleküler konsantrasyonların, kimyasal kararlı durumların nadir olması nedeniyle analitik olarak tahmin edilmesi zor olduğundan, başlangıç koşulları ve element bolluklarının önceden belirtilmesi gerekir (Semenov ve diğ. 2010). Bu nedenle öngüneş diskinde gaz halindeki organik kimyayı araştırmaya yarayacak bir model ortaya çıkarmak için bazı varsayımlar, basitleştirmeler ve sınırlamalar yapılmıştır. Bitsch ve Battistini (2020); Price ve diğ. (2020); Eistrup

Çizelge 1.  $\text{H}_2$ 'ye göre elementlerin molar bolluğu.

$\text{H}_2$	1
He	0.19
O	$1.07 \times 10^{-3}$
C	$5.90 \times 10^{-4}$
N	$1.48 \times 10^{-4}$

ve diğ. (2018); Moriarty ve diğ. (2014); Bond ve diğ. (2010b); Dodson-Robinson ve diğ. (2009) tarafından da uygulandığı gibi yalnızca durgun bir disk profili ile kimyasal dağılım arasındaki direkt ilişkiye odaklanmaktadır. Statik disk modeli, su ve disk dinamiklerinden önemli ölçüde etkilenmeyen karbon moleküllerinin bolluğunu tahmin etmek için işe yaramaktadır (Price ve diğ. 2020).

Disk kimyası için az önem taşıdığı bilinmekte olan viskozite, iyonlaşma, heterojenlik, izotopik anomaliler, yoğunlaşma, disk rüzgarları, yıldız ışınımı, manyetizasyon, gaz ile tozun dikey, radyal ve bağlı hareketleri, opaklık, fotoiyonizasyon, yıldız kirliliği, kütle çekim dengesizliği, türbülans, gaz devi göç hareketleri ile açısal momentum gibi dış etkiler ve dönüşüm tepkimeleri için katalizörler gibi iç etkiler dikkate alınmamıştır (Boss 2004; Semenov ve Wiebe 2011).

Moses ve diğ. (2011) çalışmasına benzer şekilde, organik bileşiklerin davranışını analiz etmek için sadece karbon, hidrojen, oksijen ve azot arasındaki tepkimeler dikkate alınmış, mothersik ve kaya oluşturucu elementler, fosfor, kükürt ve iyonlar hesaplara katılmamıştır. Karbon, oksijen ve azot ana elementlerinin öngüneş diskindeki bollukları Pekmezci ve diğ. (2020) çalışmasında bahsedildiği gibi derlenmiştir ve  $\text{H}_2$  üzerinden oranları Çizelge 1'de gösterilmektedir.

Kimyasal tepkime hesabı için gelişmiş bir yazılım olan HSC Chemistry 7.1 kullanılmıştır (kısaca "HSC" olarak anılacaktır). HSC, 25 000'den fazla kimyasal bileşik için entalpi, entropi ve ısı kapasitesi verilerini içeren bir termokimyasal veri tabanı çerçevesinde tüm hesaplama seçeneklerinin otomatik olarak kullanılması özelliğine dayanmaktadır (Roine 2006). Bu program, dengedeki bir kimyasal sistem üzerindeki muhtelif değişkenlerin etkileri için güvenilir hesaplamalar sunmakta (Roine 2006) ve sistem için minimum Gibbs serbest enerjisiyle denge bileşimini ayrıntılı olarak vermektedir (Bond ve diğ. 2010a). Kullanıcı, elementlerin miktarını ve sistem koşullarını belirlediğinde kod, ürün miktarlarını hesaplayacaktır (Roine 2006). Güneş Diski kimyası, süpernova püskürtüleri, gezegenler arası toz mineralojisiyle ilgilenen çalışmaların HSC yazılımından başarıyla yararlandığı bilinmektedir (Bond ve diğ. 2010a).

Ağır karbon zincirlerinin kararlı durumdun uzak olduğu bilindiğinden, çoğunlukla azot içeren moleküllerin bazı istisnaları dışında, koda dahil edilen moleküller maksimum üç karbon-karbon bağı ile sınırlandırılmıştır (Semenov ve Wiebe 2011). Çizelge 2 hesaba dahil edilen bileşiklerin tam listesini vermektedir. Gaz fazına giren yaklaşık 340 element ve bileşik, yanı sıra çoğunlukla uzun zincirli katı oksit, nitrür ve karbür molekülleri de mevcuttur. Yoğunlaştırılmış karbonun üçüncü allotropları olan grafit, elmas, fullerenerler ( $\text{C}_{60}$  ve  $\text{C}_{70}$ , Kroto ve diğ. 1985) ve amorf olmak üzere beş saf karbon bileşiği de saf katı karbon varyasyonlarının davranışını gözleyebilmek için dahil edilmiştir.

Her kimyasal tepkimenin sıcaklığa bağlı olarak spesifik bir hızda ilerlediği bilindiğinden (Fegley 2000; Aikawa ve diğ.

Çizelge 2. Öngüneş diski organik gaz kimyası için hesaba dahil edilen moleküller.

C	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N	CH <sub>2</sub> COO	CH <sub>3</sub> OH	H <sub>2</sub> CN <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> · H <sub>2</sub> O
C(Amorf)	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> NO	CH <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> ONO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> CNO	N <sub>2</sub> O
C(Elmas)	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> HNO	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N	C <sub>3</sub> HN	CH <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	H <sub>2</sub> O	N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
C(Grafit)	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	C <sub>2</sub> HNO <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>9</sub>	C <sub>3</sub> N	CH <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub> N	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
C <sub>10</sub> N	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> HO	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> NO	C <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	CH <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	CH <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	H <sub>3</sub> CNO	N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
C <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> N	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	CH <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
C <sub>11</sub> N	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O	C <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> NO	CH <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	HCCN	N <sub>3</sub>
C <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>4</sub> N	CH <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	HCN	NCN
C <sub>2</sub> H	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> N <sub>4</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	HCNH	NCO
C <sub>2</sub> H(NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N	C <sub>2</sub> N <sub>6</sub> H <sub>12</sub> · CO <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> COO	C <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> O	CH <sub>5</sub> N	HCNO	NH
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> N <sub>6</sub> O <sub>12</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>5</sub> N	CH <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	CH <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	HCO	NH <sub>2</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> (NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> NO	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub>	C <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> OH	CH <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	HCOO	NH <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> COO	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NO	C <sub>2</sub> O	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	C <sub>6</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	HCOOH	NH <sub>2</sub> OH
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	C <sub>60</sub>	CH <sub>3</sub> N	CH <sub>6</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	HN <sub>3</sub>	NH <sub>3</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>6</sub> N	CH <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	CHN <sub>2</sub>	HNC	NH <sub>4</sub> HCO <sub>3</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> NO	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O	C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	C <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> N <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	CHO <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	HNCO	NH <sub>4</sub> N <sub>3</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	C <sub>7</sub>	CH <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CN	HNO	NH <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ONO <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N	C <sub>70</sub>	CH <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	CN <sub>2</sub>	HNO <sub>2</sub>	NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO	C <sub>7</sub> N	CH <sub>3</sub> NHNHCH <sub>3</sub>	CN <sub>4</sub> O <sub>8</sub>	HNO <sub>3</sub>	NH <sub>4</sub> OH
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	C <sub>8</sub>	CH <sub>3</sub> NO	CO	HO <sub>2</sub>	NO
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	C <sub>8</sub> N	CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	HOCN	NO <sub>2</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O	C <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	COH	HONC	NO <sub>3</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NO	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> NO	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> ONO <sub>2</sub>	C <sub>9</sub> N	CH <sub>3</sub> O	COOH	N	O
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> O	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	CCN	CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	H	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	CH	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> H	O <sub>3</sub>
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	CH(NO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	N <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	OH
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> NO	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O	H <sub>2</sub> CN	N <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	

1999), mümkün olduğu kadar çok tepkimeyi içermek ve disk boyunca değişen dinamikleri gözlemlemek için geniş bir sıcaklık aralığı tercih edilmiştir. HSC yazılımının güvenli kullanımı minimum 100 K sıcaklıkla sınırlıdır ve daha sıcak bölgelerdeki moleküllerin ve atomların dejenerasyonu nedeniyle maksimum 2000 K seçilmiştir. Prinn ve Fegley (1981) tarafından da aynı sıcaklık aralığı kullanılmıştır.

Basınç ise 10<sup>-4</sup> barda sabit tutulmuştur. Bu değer, Güneş'ten 1 AB uzaklık bölgesinde karakteristik toplam basınç olması nedeniyle Güneş diski çalışmaları için geleneksel bir değer olarak kabul edilir (Bond ve diğ. 2010b; Fegley 2000; Lodders 2003).

## 2.2 Karbon Denge Tepkimesi

Bir yıldız diskinde bulunan bileşikler arasındaki kimyasal ilişkilerin gerçek doğası, değişen sıcaklık, basınç, yoğunluk, zaman, fiziksel koşullar ve mevcut çok sayıda atomik ve moleküler gaz göz önüne alındığında oldukça karmaşıktır. Bu nedenle tepkime arka planı için dikkate alınan moleküller, yalnızca sonuçlarda daha fazla bolluk ve/veya daha yüksek önem açısından öne çıkan element ve bileşiklerle sınırlıdır.

Öngüneş diskinde çeşitli teorik çalışmalar tarafından önerilen ve buradaki sonuçlarda gösterilen gaz fazlı iki önemli denge tepkimesi vardır. Bunlardan biri karbon kimyasının temel redoks çifti, CO-CH<sub>4</sub> ve bunların birbirine dönüşümü, diğeri ise azot döngüsü, N<sub>2</sub>-NH<sub>3</sub> dönüşümüdür.

Öngüneş diski ortamına gelince, baskınlık, evrenin geri kalanında olduğu gibi hidrojen ve helyum gazlarına aittir, ardından daha sıcak bölgelerde atomik hidrojen gelir. H üretim hızı, CO, H<sub>2</sub>O ve CH<sub>4</sub>'ün kesin bolluklarına duyarlı değildir ancak disk sıcaklık profiline duyarlıdır (Liang ve diğ. 2003). Diğer baskın moleküller, CO ve N<sub>2</sub>, disk soğudukça CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>,

NH<sub>3</sub> ve HCN'ye dönüştürülür (Aikawa ve diğ. 1999; Cyr ve diğ. 1999; Fegley ve Lodders 1996; Lewis ve Prinn 1980; Prinn ve Fegley 1981).

### 2.2.1 Su

Gaz fazında H<sub>2</sub>O üretimi başlangıçta H ve OH arasındaki ışınımsal rekombinasyon veya CH<sub>4</sub> veya CO gibi nötr moleküller ile sağlanır (bkz. tepkime 1, Semenov ve Wiebe 2011). Bu tepkime, oksitleyici koşulların su bolluğunu artıracığı, indirgeyici koşulların ise azaltacağı ortamın redoks durumuna oldukça duyarlıdır (Liang ve diğ. 2003).

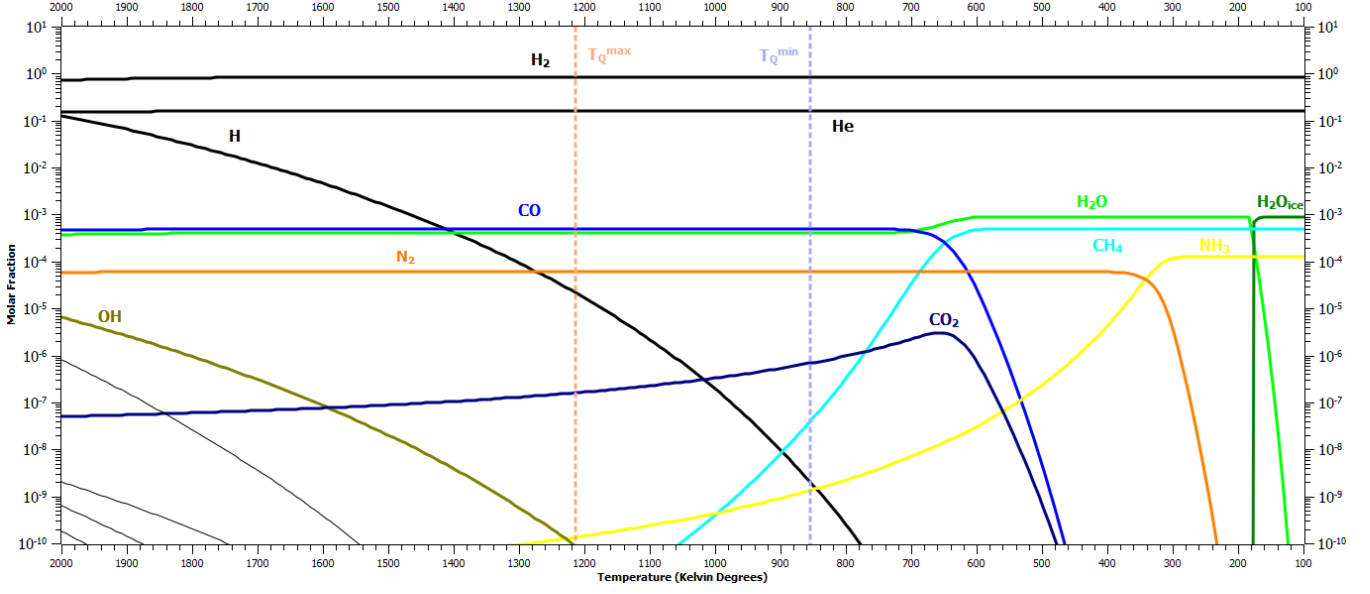
### 2.2.2 Karbon

Bölgesel sıcaklık ve basınca bağlı olarak ana karbon rezervuarları CH<sub>4</sub>, CO ve CO<sub>2</sub>'dir (Lodders ve Fegley 2002). Denge koşulu altında, düşük sıcaklıklar ve yüksek basınçlar için CH<sub>4</sub> bol miktarda bulunurken sıcaklığın yüksek ve basıncın düşük olduğu yerlerde CO baskındır (Burrows ve Sharp 1999; Lodders 2003; Lodders ve Fegley 2002).

CO, yıldızlararası ortamda ve öngüneş diskinde neredeyse tüm karbon içeriğinin tutulduğu ilk gaz molekülü olduğundan karbon hesaplamasını CO'dan başlatmak mantıklıdır (Aikawa ve diğ. 1999; Kress ve Tielens 2001; Semenov ve Wiebe 2011). Daha sonra CO<sub>2</sub> ve CH<sub>4</sub>, iyon ve molekül tepkimeleri yoluyla CO'dan üretilir (Aikawa ve diğ. 1999).

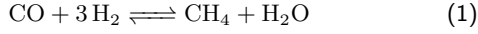
İlk CO dönüşümü, kozmik ışınlarla H<sub>2</sub> iyonizasyonunun ürünü olan H<sub>3</sub><sup>+</sup> ile tepkimeye girerek HCO'ya dönüşür (Aikawa ve diğ. 1999). HCO ve O veya N arasındaki tepkime, CO<sub>2</sub> ve HCN oluşumuna yol açar (Aikawa ve diğ. 1999).

Kozmik ışın iyonizasyonu ile oluşan helyum iyonları CO ile tepkimeye girer ve C<sup>+</sup> üretir. H<sub>2</sub>, H ve C<sup>+</sup> kombinasyonu ile CH<sub>5</sub><sup>+</sup> oluşur ve sonunda CH<sub>4</sub>'e dönüştürülür (Aikawa ve diğ.



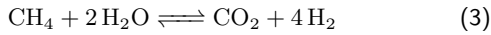
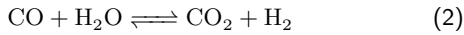
Şekil 1.  $10^{-4}$  barlık basınç altında öngüneş diskindeki baskın element ve moleküller.  $0,1$  ppb'ye kadar azalan bolluk sırasına göre O, NO, N ve  $O_2$ 'dir. Kesikli çizgiler CO  $\rightarrow$  CH<sub>4</sub> dönüşümünün sönüm sıcaklığı sınırlarını göstermektedir.

1999). CO – CH<sub>4</sub> dönüşümü aşağıdaki gibi özetlenebilir:



Bu tepkime, yüksek basınçlarda ve düşük sıcaklıklarda ürünler yönüdeyken düşük basınçlarda ve yüksek sıcaklıklarda tepkiyenler yönünde gerçekleşir (Visscher ve diğ. 2010) ve aslında çok sayıda ara basamaktan oluşur.

CO<sub>2</sub>, CO'nun diskte baskın olduğu bölgelerde, çoğunlukla CO–CH<sub>4</sub> dönüşümü yoluyla yan ürün olarak ortaya çıkar çünkü H<sub>2</sub>O ve CO ile dengede kalabilir (Lodders 2003; Lodders ve Fegley 2002; Moses ve diğ. 2011):



CO'nun bir kısmı diskteki CO<sub>2</sub> üretimi tarafından tüketilse de çoğunluğu CH<sub>4</sub>'ü oluşturmak için kullanılır. Sıcaklık arttıkça, tepkime 2 CO<sub>2</sub> bolluğunu artırarak ürünler yönünde seyredir (Lodders 2003).

### 3 Denge Durumu Sonuçları

Bu bölümde, 'HSC Kimya' kodundan elde edilen sonuçlar sunulmakta ve ortaya çıkan moleküller Şekil 1'de gösterilmektedir. Dikkate alınan bileşiklerin çokluğu göz önüne alındığında tartışmalar 1 ppm (milyonda bir) oranının üzerinde bir kesirsel orana sahip olanlarla sınırlanmıştır. Bununla birlikte su ve metan gibi çok önemli bileşikler için davranış açıklamaları 1 ppb (milyarda bir) oranına kadar indirgenmiştir.

Öngüneş diskinin gerçekçi element bolluklarıyla elde edilmiş bulgular, Fegley (1988), Fegley ve Lodders (1996), Lewis ve Prinn (1980), Lewis (1974), Prinn ve Fegley (1981) gibi klasik çalışmalarla ve Lewis (2004) ile Lodders ve Fegley (2002) gibi modern çalışmalarla oldukça uyumludur.

Basınçtan bağımsız olarak, toplam oksijen miktarı %45 ile H<sub>2</sub>O ve %55 ile CO arasında yarı eşit olarak paylaşılmakta ve

her ikisi de yüksek sıcaklıklarda kararlı kalmaktadır. CO – CH<sub>4</sub> dönüşümünden sonra tüm oksijen içeriği H<sub>2</sub>O'da tutulmaktadır.

Tüm karbon içeriği ise yüksek sıcaklıklarda CO – CH<sub>4</sub> dönüşümü başlayana kadar CO molekülleri ve önemsiz bir miktar CO<sub>2</sub> tarafından kullanılmaktadır. Dönüşümün gerçekleştiği yerden daha soğuk bölgelere doğru, CH<sub>4</sub> en az  $0,1$  ppb'ye kadar karbon atomlarının tek taşıyıcısıdır.

Toplam basıncı  $0,1$  milibar olarak alınan öngüneş diskinde 2000 ila 100 K sıcaklık aralığında H<sub>2</sub> ve He'den sonra hakim olan moleküller, 1 ppm'ye kadar azalan sırayla, H<sub>2</sub>O (buhar ve buz), CO ve CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, CO<sub>2</sub> ve OH olarak bulunmuştur.

#### 3.1 H<sub>2</sub>O

Hesapların sonucunda su, 450 ppm molar oranla 1840–730 K sıcaklık bölgesinde gözlenmektedir. Daha yüksek sıcaklık bölgelerinde, kısmen iyonlarına ayrışır. 730 K'den 600 K'e H<sub>2</sub>O, CO – CH<sub>4</sub> dönüşümü ile 900 ppm'ye yükselir.

185 K'e kadar tüm su molekülleri gaz fazında iken 178–160 K sıcaklık aralığında buz ve gaz birlikte bulunur. Ancak daha düşük sıcaklıklar su buharının oluşmasına izin vermez.

#### 3.2 CO, CH<sub>4</sub> ve CO<sub>2</sub>

Yaklaşık 450 ppm olan CO molar oranı sıcaklığın 730 K'e düşmesinden etkilenmemektedir. CO, önce 705 K'de H<sub>2</sub>O ile 400 ppm ile, daha sonra 650 K'de CH<sub>4</sub> ile 270 ppm ile eşit miktara ulaşmaktadır. Bu eşmolar bolluk sıcaklığı Lodders (2003) tarafından da doğrulanmıştır ve Lewis ve Prinn (1980) tarafından 680 K olarak verilmiştir. 590 K'den daha soğuk bölgelerde CH<sub>4</sub>, CO'nun ilk miktarında sabittir. CO'nun  $10^{-4}$  bar altında CH<sub>4</sub>'e dönüşmeye başladığı sıcaklık Lodders (2003) hesaplamalarıyla da doğrulanmıştır.

CO<sub>2</sub> ise 610 ila 800 K sıcaklık bölgesinde görülmekte ve maksimum 3 ppm'lik bir orana ulaşmaktadır.

### 3.3 OH

OH moleküllerinin 2000 K'de 7 ppm'den 1800 K'de 1 ppm'ye düşüş gösterdiği gözlemlenmektedir.

## 4 Denge Sonuçları Üzerinden Tartışma

Öngüneş diskinin denge gaz kimyası için sonuçları belirledikten sonra, Güneş Sistemi koşulları ve cisimleri ile daha fazla yorumlama ve karşılaştırma yapılabilir.

Güneş Sistemi cisimlerinden bazıları öngüneş diski bileşimi ve koşulları ile korelasyon göstermektedir. Gezegenlerdeki CH<sub>4</sub> bolluğunun Güneş'ten uzaklaştıkça arttığı bilinmektedir (Wong ve diğ. 2008). Ayrıca dev gezegenlerin uyduları genellikle erken dönem gezegenlerin veya onların çevrelerindeki disklerin bileşimi ile bir tutarlılık sergilemektedir (Wong ve diğ. 2008).

Ancak bazılarının oluşum tarihi hala çözülememiştir. Bunların farklı karbon kimyası bölgelerinden kaynaklandığı düşünülmektedir (Wong ve diğ. 2008). Örneğin Satürn'ün buzlu uyduları, H, O, C ve N ölçümlerine dayalı olarak Güneş kompozisyonu ile tutarsızlık göstermektedir (Prinn 1993). Bu nedenle diskte beklenene göre fazla su bolluğu olan bir ortamda oluştukları, muhtemelen CH<sub>4</sub> bakımından zengin bir ortamdan kaynaklandıkları ve/veya oluşumlarından sonra meydana gelen diğer işlemler tarafından değişime uğradıkları düşünülmektedir (Prinn 1993; Wong ve diğ. 2008).

Bu bölümde, Dış Güneş Sistemi'ndeki bazı gezegenlerin ölçülen CO veya CH<sub>4</sub> bollukları, ön-gezegen diskinin termokimyasal denge modeline dayalı uygun bir sonuçla karşılaştırılacak ve atmosferik bileşim ölçümleriyle tutarlılık gösterip göstermedikleri incelenecektir. Önceki çalışmalardan farklı olarak dış gök cisimleri için ölçülen bu iki temel karbon içeren gazın bollukları, Güneş'in kendisinin element bolluklarıyla değil öngüneş diskinin denge hesaplamalarının sonuçlarıyla kıyaslanacaktır.

Belirtmekte yarar var ki dış gezegenlerin atmosferlerine girilerek veya yerden yapılmış ölçümler ile bu ve her biri için aşağıda bahsi geçen çalışmaların hesapladığı bolluk değerleri, gezegenlerin kümülatif bolluğunu temsil ediyor değildir. Atmosferlerdeki sıcaklık-basınç profili, rüzgarlar, yağış ve diğer faz değişimleri gibi dinamiklerin yanı sıra, katı çekirdeklerin muhtemel varlığı gezegenlerin iç katmanlarındaki kimyasal bolluk dağılımlarını farklılaştıracaktır.

### 4.1 Jüpiter

Jüpiter'in atmosferi kütle olarak %75 hidrojen ve %24 helyumdan oluşur (Kunde ve diğ. 2004). CH<sub>4</sub> moleküler karışım oranı GPMS türevi ile  $\sim 2.4 \times 10^{-3}$  olarak bulunmuştur (Wong ve diğ. 2008). Voyager IRIS verilerinden  $\sim 1.95 \times 10^{-3}$ , CIRS ile  $\sim 5.1 \times 10^{-3}$  ölçülmüş ve son olarak yer tabanlı gözlemlerle 1100–1200 cm<sup>-1</sup> tayf aralığında  $\sim 2.5 \times 10^{-3}$  olduğu elde edilmiştir (Wong ve diğ. 2008).

Bu çalışmanın öngüneş diski denge hesaplamalarında CH<sub>4</sub> molar oranı  $10^{-3}$  seviyesine ulaşmamaktadır. Maksimum CH<sub>4</sub> oranı ilgili sıcaklık aralığında  $4.96 \times 10^{-4}$  olarak hesaplanmıştır. CO – CH<sub>4</sub> eşit bolluk sıcaklığından daha soğuk bölgelerde ise bu değerde sabit kalmaktadır.

Bu sebeple öngüneş diski için termokimyasal denge varsayımı temelinde, Jüpiter atmosferinin CH<sub>4</sub> bolluğu konusunda dengesizlik disk bileşimine kıyasla zengin olduğu bulunmuştur. GPMS ölçümlerine göre zenginleşme oranı 4.84'tür. Bu oran Voyager IRIS'e göre 3.93, CIRS ölçümlerine göre ise 10.28 olarak hesaplanmıştır. Yerden yapılan gözlemler

göre 5.04'tür. Jüpiter atmosferindeki CH<sub>4</sub> bolluğunun zenginleşme aralığı, öngüneş diski için termokimyasal denge modeli temelinde  $\sim 4$  ila  $\sim 10$  kat arasında uzanır. Bu aralık, Wong ve diğ. (2008) tarafından hesaplanandan biraz daha yüksektir. Anders ve Grevesse (1989)'nin Güneş kompozisyonunu kullandıklarında ise diskten 3 kat daha yüksek çıkmıştır.

### 4.2 Satürn

Satürn'ün dış atmosferi %96.3 hidrojen ve %3.25 helyum içerir (Guillot ve diğ. 2009). Satürn atmosferinin karbon içeriğine CH<sub>4</sub> hakimdir ve iyi karışmış olduğu düşünülmektedir (Fletcher ve diğ. 2012). CH<sub>4</sub>'ün moleküler oranı Cassini uçuşu ile  $4.7 \times 10^{-3}$  ve CIRS ile  $4.5 \times 10^{-3}$  olarak ölçülmüştür (Fletcher ve diğ. 2012).

Jüpiter örneğinde bahsedildiği gibi öngüneş diski için maksimum CH<sub>4</sub> oranı ilgilenilen sıcaklık aralığında  $4.96 \times 10^{-4}$  olarak hesaplanmıştır. Satürn atmosferindeki CH<sub>4</sub> miktarının zenginleşmesi, öngüneş diski termokimyasal denge sonuçlarına göre 9.1 kat daha fazla bulunmuştur. Wishnow ve diğ. (2007) bu zenginleşmeye 9.9 ile çok yakın bir değer vermiştir.

### 4.3 Uranüs

Görünür ve yakın kızılötesi bantlarda ölçülen Uranüs atmosferi öncelikle hidrojen ve helyum, ardından %2.3 molar oranlı metan içerir (Lindal ve diğ. 1987; Lunine 1993). Bu oran öngüneş diski termokimyasal bileşimi için hesaplanan maksimum CH<sub>4</sub> oranından 46.37 kat zenginleşmeyi gösterir. Zenginleşme faktörü, Lindal ve diğ. (1987) tarafından önerilenden yaklaşık 1.5–2 kat daha yüksektir. Lunine (1993) ise bu değeri Güneş'teki karbon içeriğinin yaklaşık 20 ila 30 katı kadar vermiştir. Wong ve diğ. (2008), Voyager radyo ölçümü ve yer tabanlı optik tayf ölçümlerine dayanarak Güneş değerinden 18-50 kat daha bol bir aralık olarak belirtmiştir.

### 4.4 Neptün

Neptün'ün yüksek irtifa atmosferik bileşimi %80 hidrojen, %19 helyum ve eser miktarda metandır (Hubbard 1997). Stratosferik CH<sub>4</sub> oranı AKARI kızılötesi verilerinden 50 mbar seviyesinde  $9 \times 10^{-3}$  olarak ölçülmüştür (Luszcz-Cook ve de Pater 2012). Bu değer Neptün'ün atmosferi için temsili bir sayı olarak alınırsa öngüneş diskinin termokimyasal denge modeline göre hesaplanan maksimum CH<sub>4</sub> miktarına göre 18.15'lik zenginleşme faktörü gösterir. CH<sub>4</sub>'ün Neptün'ün stratosferinde doymuş olduğu bilinmektedir (Luszcz-Cook ve de Pater 2012; Yelle ve diğ. 1993). Ancak buradaki zenginleşme faktörü, Wong ve diğ. (2008) tarafından verilen aralığın en düşük değerinin neredeyse yarısı kadardır. Voyager radyo ölçümlerine ve yer tabanlı optik tayf ölçümlerine dayanan Güneş bolluğunun ise 28–63 katıdır.

## 5 Denge Dışı Hesaplamaları

Bir tepkimenin söneceği ya da dengesinin korunacağı, tepkimenin tamamlanma süresi ile diskin soğuma süresinin karşılaştırılmasıyla belirlenir. Bu nedenle yapılacak ilk iş, tepkime zincirinin en yavaş adımını bularak CO  $\rightarrow$  CH<sub>4</sub> dönüşümü için gerekli zaman ölçeğini hesaplamaktır. Uygun disk zaman ölçeğini seçtikten sonra, tepkime için sönüm sıcaklığı, bu iki zaman ölçeğinin eşit olduğu bölge olarak tespit edilebilir.

Bu çalışmada verilen tepkime adımlarıyla yalnızca CO –

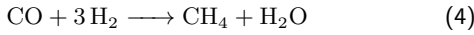


CH<sub>4</sub> dönüşümüne odaklanılmaktadır. Öngüneş diskinin kaotik doğası göz önüne alındığında karmaşık bir şekilde meydana gelen ve birbirini etkileyen birçok başka tepkime olmalıdır. Bu nedenle CO – CH<sub>4</sub> dönüşümünün tepkime zincirlerine katılan moleküller, büyük olasılıkla başka kimyasal tepkimelere de dahil olabilir. Çalışmanın sınırları nedeniyle, tepkimelerin geri kalanı için sönüm mekanizmaları ihmal edilmiştir.

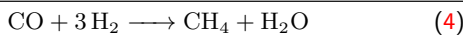
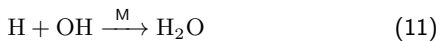
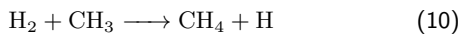
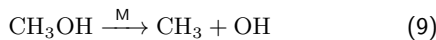
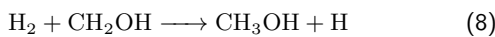
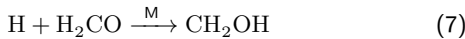
### 5.1 CO → CH<sub>4</sub> Dönüşümü için Hız Sınırlayıcı Adım

Kimyasal denge tepkimeleri genellikle sadece başlangıç tepkiyenleri ve nihai ürünler olarak verilir, ancak bu sadece kısaltılmış bir formdur (Fegley 2000). Tepkimeler aslında farklı hızlarda ilerleyen karmaşık ara tepkimelerle zincirlenmiş olarak adım adım ilerler (Fegley 2000). Bu nedenle bir denge tepkimesine gerekli süreyi hesaplamak için anahtar parametre olarak en yavaş adım alınır (Fegley 2000).

Öngüneş diskinde CO yüksek sıcaklıklarda ve düşük basınçlarda baskın karbon gazıdır. Buna karşılık, düşük sıcaklıklarda ve yüksek basınçlarda CH<sub>4</sub> bol bulunur (Fegley 2000). CO ve CH<sub>4</sub> arasındaki net termokimyasal tepkime aşağıdaki gibidir:



Bir metan ve bir su molekülü üretmek için üç hidrojen molekülünün bir anda karbon monoksit molekülü ile çarpışması beklenemez (Fegley 2000). Önerilen temel aralık tepkimeleri, farklı çalışmalara göre kısmen değişebilmektedir. Bu çalışmada tepkime adımlarının Visscher (2011) tarafından tarif edilen şekilde ilerlediği varsayılmaktadır. İlgili tüm tepkimelerin nispi oranlarının karşılaştırılmasından sonra çizilen ana kimyasal adımlar ve tepkime hızı hesaplamalarındaki güncellemeler ışığında en olası CO – CH<sub>4</sub> dönüşüm yolu Visscher (2011) tarafından belirlenmiştir. Gaz devi atmosferleri ve öngüneş diski denge kimyasına da güvenle uygulanabilen tepkime zinciri aşağıda verilmiştir:

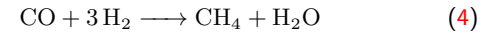
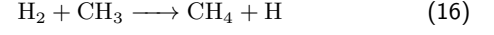
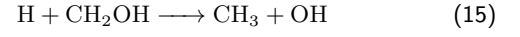
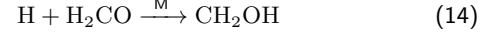
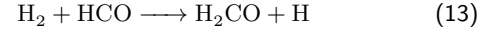


Burada M, CH<sub>4</sub>'te H<sub>3</sub>C–H bağının ve H<sub>2</sub>O'da H–OH bağının oluşumuyla salınan enerjiyi absorbe etmek için gerekli olan üçüncü bir molekülü (Visscher 2011), öngüneş diskinde istatistiksel olarak H<sub>2</sub>'yi, temsil eder (Fegley 2000).

“H + CH<sub>3</sub>OH → ürünler” için Moses ve diğ. (2011) çalışmasını ve “CH<sub>3</sub> + OH → ürünler” için Jasper ve diğ. (2007) çalışmasını göz önünde bulundurarak hesaplanan güncellenmiş tepkime hızı katsayılarıyla, metanolün CH<sub>3</sub>OH  $\xrightarrow{\text{M}}$  CH<sub>3</sub> + OH denklemiyle termal ayrışmasının en yavaş tepkime olduğu bulunmuştur. Bu nedenle, yukarıdaki tepkime şemasında CO – CH<sub>4</sub> dönüşümü için hız sınırlayıcı adımdır (Visscher 2011).

CO sönüm mekanizmasının ayrıca bazı koşullar altında tamamen Visscher (2011) tarafından önerilen aşağıdaki

mekanizma yoluyla CH<sub>3</sub>OH'yi atlaması da beklenebilir:



Hız sınırlayıcı adım, H + CH<sub>2</sub>OH → CH<sub>3</sub> + OH tepkimesi yoluyla olsa da yine CH<sub>3</sub> + OH üretimidir. Daha doğru bir tahmin için olası yavaş adımların her ikisi de dikkate alınmıştır. Daha sonra CO'nun kimyasal ömrü aşağıdaki gibi hesaplanır (Visscher 2011).

$$t_{\text{kimyasal}}(\text{CO}) = \frac{[\text{CO}]}{-d[\text{CO}]/dt} \quad (18)$$

$$= \frac{[\text{CO}]}{k_{(9)}[M][\text{CH}_3\text{OH}] + k_{(15)}[\text{H}][\text{CH}_2\text{OH}]}$$

Tepkime 9 ve 15 için tepkime hızı katsayıları Tsang (1987) tarafından sağlanan JANAF veri tabanından toplanmış ve 300–2500 K sıcaklık aralığı için tanımlanmıştır:

$$k_{(9)} = 1.9 \times 10^{16} [\text{s}^{-1}] e^{-384 [\text{kJ/mole}]/RT} \quad (19)$$

$$k_{(15)} = 1.6 \times 10^{-10} [\text{cm}^3/\text{molecule s}] \quad (20)$$

R, 8.314472 × 10<sup>-3</sup> kJ/mol K değeriyle ideal gaz sabitini temsil eder. Alakalı gazların molar bollukları Pekmezci ve diğ. (2020) tarafından açıklandığı ve yukarıda gerçekleştirildiği şekilde gaz fazı denge hesaplamaları temelinde HSC kodu yardımı ile hesaplanmıştır. Hesaplanan minimum ve maksimum sönüm sıcaklığı için molar bolluklar detaylandırılmıştır.

### 5.2 Disk Süresi

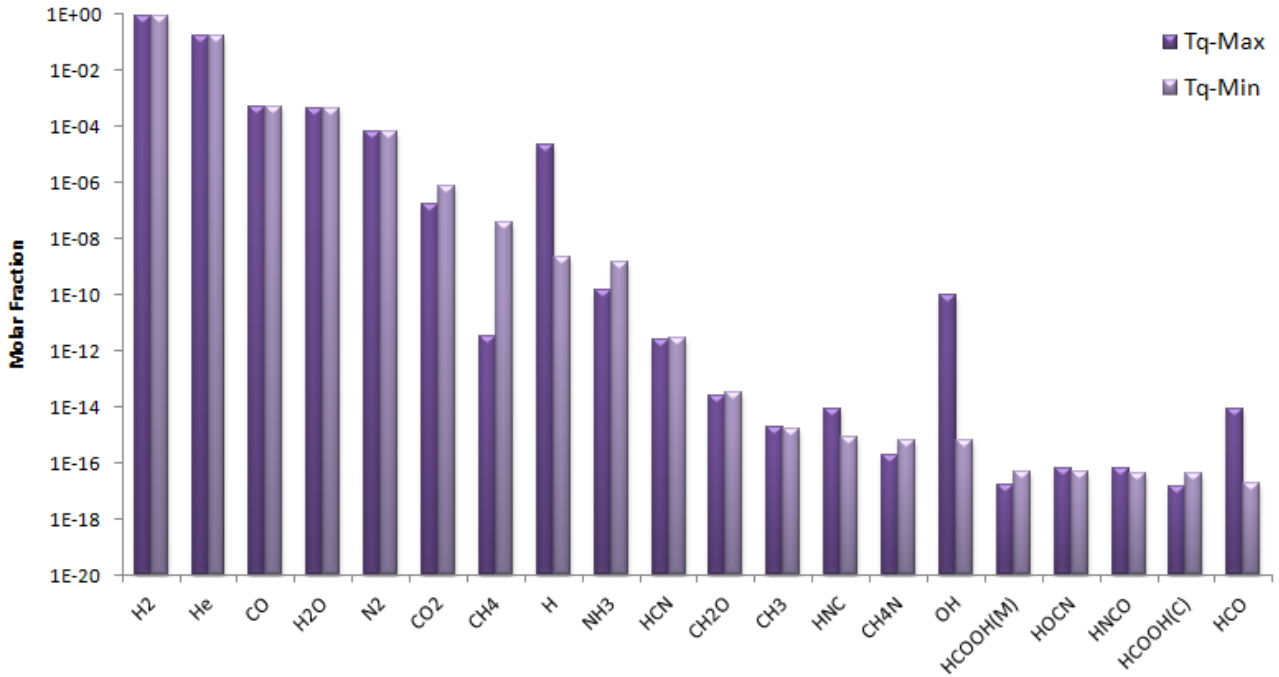
Disk zaman ölçeğinde ise, farklı disk türbülans karıştırma senaryolarını karşılamak ve sönüm sıcaklığı için tek bir değer yerine bir aralık belirlemek için bir minimum ve bir maksimum değer göz önüne alınmıştır. Bu ölçek, gaz halindeki öngüneş diskinin ömrü kadar uzun ya da gazın ve parçacıkların farklı sıcaklık bölgeleri arasında radyal taşınmasıyla sınırlı olabilir (Fegley 2000; Aikawa ve diğ. 1999).

Disk karışma süresi için kesin bir değer tahmin etmek zordur. Bununla birlikte öngüneş diskinin ömrü için mevcut varsayımlar yaklaşık 3–300 × 10<sup>12</sup> saniyedir (yaklaşık 0.1–10 milyon yıl) (Fegley 1988, 2000; Prinn ve Fegley 1981). Disk ömrü olarak t<sub>disk</sub> için en üst limiti almak diskin ömrü boyunca bir kez karıştığını veya toplam soğuma süresinin gazlı diskin ömrü ile aynı olduğunu varsaymakla eşdeğerdir (Fegley 2000). Rakamları sadeleştirmek için t<sub>disk</sub> üst sınırında 3 faktörü ihmal edilmiş ve Prinn (1993) ile Prinn ve Fegley (1981) tarafından da yapıldığı gibi ortalama 10<sup>13</sup> saniye alınmıştır.

Minimum ve maksimum disk süresi için sönüm sıcaklıklarının belirlenmesinden sonra bu iki uçtaki kimyasal bileşim aralığı, CO – CH<sub>4</sub> oranına odaklanılarak hesaplanmıştır. Hesaplara katılan organik, gaz ve buz bileşiklerinin tam listesi Çizelge 2'de verilmiştir.

### 6 Denge Dışı Sonuçları

CO – CH<sub>4</sub> dönüşümü için, sönüm sıcaklığı ve/veya konumu



Şekil 2. Basınç  $10^{-4}$  bar ve sıcaklık 1214 K (Tq-Max) ve 855 K (Tq-Min) iken öngüneş diskindeki baskın bileşiklerin molar oranları.

yaklaşımı bollukların makul bir tahminini sağlar (Aikawa ve diğ. 1997; Visscher 2011). Aşağıda, CO – CH<sub>4</sub> dönüşümünün sönüm sıcaklıkları için hesaplanan gaz fazı bileşimleri  $10^{-4}$  bar basınç altında bildirilmiştir. Buna karşılık gelen maksimum ve minimum sönüm sıcaklıkları için bileşiklerin beklenen yaklaşık moleküler oranları 2'de sunulmuştur. Ne kadar zaman geçerse geçsin, tepkimenin nerede durduğuna veya ortamın soğuduğuna bakılmaksızın, bu değerler, az ya da çok, sabit bir bollukta kaldıklarında tepkiyen (CO) ve ürün (CH<sub>4</sub>) arasındaki oranları temsil eder.

Minimum veya maksimum sönüm sıcaklığı bolluklarından birinde moleküler kesirsel oranı  $10^{-20}$ 'nin üzerinde olan bileşikler grafikte görülmektedir. CO – CH<sub>4</sub> dönüşümünün tepkime zincirlerinde önemli oldukları için radikaller de dahil edilmiştir. Doymamış hidrokarbonlar, nitriller, atomik bileşikler ve CH<sub>3</sub>, OH ve NH<sub>2</sub> gibi radikallerdeki zenginleşme, denge dışı kimyasının doğal bir sonucudur (Moses ve diğ. 2011). Grafikteki moleküller, minimum sönüm sıcaklığındaki oranları azalan sırada olacak şekilde hizalanmıştır. Bununla birlikte, moleküllerin kararlılığını değerlendirmeden, verilen sıcaklık ve basınç koşulu altında, Şekil 1'in kompozisyonu sadece belirli bir an için gösterdiğine dikkat edilmelidir.

Güneş'in kimyasal bileşimi ve  $10^{-4}$  bar basınca sahip bir öngüneş diski için CO'nun CH<sub>4</sub>'e oranı maksimum (1214 K) ve minimum (855 K) sönüm sıcaklığında aşağıda verilen aralıkta bulunmuştur. Bu da Hueso ve Guillot (2005) tarafından hesaplanan disk profiline göre öngüneşten sırayla 0.076 ila 0.127 AB'lik mesafeye karşılık gelmektedir:

$$1.5 \times 10^8 \gtrsim \text{CO} : \text{CH}_4 \gtrsim 1.3 \times 10^4 \quad (21)$$

Şekil 2'de sunulan ve H<sub>2</sub> ile He'den sonra önde gelen moleküller, her iki sönüm sıcaklığı için de ortak olan CO, H<sub>2</sub>O ve N<sub>2</sub> haricinde, minimum sönüm sıcaklığında CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H ve NH<sub>3</sub> iken maksimumda H, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub> ve OH'dir.

Bu çalışmanın bulguları CH<sub>4</sub>'ün öngüneş diskinde CO'ya

yalnızca düşük sıcaklık ve yüksek basınç şartlarında baskın olabileceğini belirten önceki bazı çalışmalar (Lewis ve Prinn 1980; Lodders 2003; Kress ve Tielens 2001; Prinn ve Fegley 1981) ile uyumlu görünmektedir. Yavaş bir süreç olmasının yanı sıra erken diskte bulunan koşulların, radyal karışma, soğuma veya diğer iç ve dış kuvvetler nedeniyle CO – CH<sub>4</sub> dönüşümünün dengesini tam olarak desteklemediği düşünülmektedir. Lakin, oran 9'da gösterildiği üzere, CO beklenenin aksine denge hesaplamalarına göre diskin soğuk bölgelerinde de baskındır. Bu yüzden tepkime bir noktada sönmüş, CH<sub>4</sub> üretimi durmuş ve soğuk bölgelerde sadece küçük miktarlarda kalmış olmalıdır.

## 7 Denge Dışı Sonuçları Üzerinden Tartışma

Denge dışı yaklaşımı ile, denge yaklaşımı ile tahmin edilenden farklı olarak uzak ve soğuk bölgelerde dahi öngüneş diskinin gaz bileşimine H ve He'den sonra CO'nun hakim olduğu görülmüştür. Bu, moleküler bulutlardan gelen kozmik bolluk hesaplamaları ve öngüneş diski kimyasının kinetik inhibisyon modeli ile tutarlıdır (Simonelli ve diğ. 1989).

Yine de dış gezegenlerin, CO üzerinde CH<sub>4</sub> ve genellikle N<sub>2</sub> üzerinde NH<sub>3</sub>'ün baskın olduğu atmosferlere sahip oldukları bilinmektedir. Disk koşullarında CO – CH<sub>4</sub> dengesi sağlanabilseydi veya disk karışma süresi CO'nun CH<sub>4</sub>'e tamamen dönüşmesi için yeterince uzun olsaydı bu beklenen bir sonuç olurdu. Prinn (1993) gibi çalışmalar, Jüpiter'in gezegen çevresindeki yüksek basınç nedeniyle CH<sub>4</sub>'ün kinetik olarak inhibe edilmediğini ve etrafında zengin bir CH<sub>4</sub> içeriğine neden olduğunu bildirmiştir. Ayrıca Güneş devlerinin şimdiki atmosferik bileşimlerinin yalnızca erken öngüneş diski koşullarının sonucu olarak değil zarflarındaki fiziksel ve kemodinamik süreçler tarafından da şekillendirildiği bilinmektedir.

Öngüneş diski için tipik basınç değerleri, yaklaşık 0.2 AB'nin ötesinde, CO ve CH<sub>4</sub> arasındaki dengeye olanak vermediğinden diskteki diğer bölgelere de CO hakimdir. Bu

nedenle, sönüm bölgesi için hesaplanan CH<sub>4</sub>'ün bolluğu daha uzak konumlar için de geçerlidir. Bu çalışmada yapılan denge dışı hesap ve sonuçları, literatürdeki Lewis ve Prinn (1980), Lodders (2003), Kress ve Tielens (2001) ve Prinn ve Fegley (1981) gibi Güneş diski için yapılan benzer çalışmalarla uyumludur. Bununla birlikte, sönüm sıcaklık bölgesi için beklenen bileşimlerin verilmesi çalışmayı önceki çalışmalardan bir adım ileri götürmüştür.

## 8 Değerlendirme

Dış Güneş Sistemi nesnelindeki birincil karbon bileşiği CH<sub>4</sub>'tür. Ancak bunun nedeni çevredeki diskte biriken malzemenin metan ile baskın olması değildir. Termokimyasal denge diskin evrimi için teorik bir modeldir. Bununla birlikte, koşulların dengeyi korumak ve tepkimelerin tamamlanması için yeterli zaman bulunmadığını ve ortamın yeterince elverişli olmadığını literatürdeki çalışmalar göstermektedir. Bu nedenle uzak ve soğuk bölgelerde hakim olan karbon gazının da CO olması beklenebilir. CO, öngüneş diskinden farklı sıcaklık ve basınç koşulları altında gezegen çevrelerindeki ortamlarda ve dev gezegen zarflarında CH<sub>4</sub>'e dönüştürülür.

Bu sebeple bu çalışmada, sakin bir öngüneş diskinin gaz halindeki karbon-hidrojen-oksijen kimyası hem termokimyasal denge, hem de denge dışı varsayımı altında modellenmiştir. Güneş'in bir T-Tauri yıldızı olduğu zamanki disk kimyası, ~400 organik bileşik ve ~2000 K bir sıcaklık aralığı ile geniş bir parametre havuzu altında incelenmiş ve sonuçların beklentiler ve önceki çalışmalarla uyumlu olduğu gösterilmiştir.

Güneş Sistemi cisimlerine ilişkin gözlemler, ölçümler ve tahminler, bu çalışmada hesaplanan kompozisyon ile karşılaştırılabilir, uzak uyduların ve göktaşlarının oluşum kökenlerine ilişkin koşullar ve bileşimler arasında bazı olası izler bulunabilir. Burada izlenen sistematik yaklaşımın Güneş Sistemi kimyasal modellemesi için faydalı olması ve kondritik meteoritlerin kompozisyonları, dış uyduların kökenleri ve diğer yıldız disklerinin evrimi gibi problemlere uygulanması öngörülmektedir.

## Kaynaklar

Aikawa Y., Umebayashi T., Nakano T., ve diğ., 1997, ApJ, 486, L51  
 Aikawa Y., Umebayashi T., Nakano T., ve diğ., 1999, ApJ, 519, 705  
 Aikawa Y., 2003, High. Astr., 13, XXVth Gen. Ass. IAU, Sydney, 13-26 Temmuz  
 Anders E., Grevesse N., 1989, Geoch. & Cosmoch. Acta, 53, 197  
 Bézar B., Lellouch E., Strobel D., ve diğ., 2002, Icarus, 159, 95  
 Bitsch, B., & Battistini, C. 2020, A&A, 633, A10  
 Bond J. C., Laurretta D. S., O'Brien D. P., 2010a, Icarus, 205, 321  
 Bond J. C., O'Brien D. P., Laurretta D. S., 2010b, ApJ, 715, 1050  
 Boss A. P., 2004, ApJ, 616, 1265  
 Burrows A., Sharp C. M., 1999, ApJ, 512, 843  
 Cridland, A. J., van Dishoeck, E. F., Alessi, M., ve diğ., 2020, A&A, 642, id.A229  
 Cyr K. E., Sharp C. M., Lunine J. I., 1999, Jour. Geoph. Res., 104, 19003  
 Dodson-Robinson, S. E., Willacy, K., Bodenheimer, P., Turner, N. J., & Beichman, C. A. 2009, Icarus, 200, 672  
 Eistrup, C., Walsh, C., & van Dishoeck, E. F. 2018, A&A, 613, A14  
 Fegley B., 1988, Workshop on the Origins of Solar Systems, 51-59, MIT  
 Fegley B., 2000, Space Science Reviews, 92, 177  
 Fegley B., Lodders K., 1994, Icarus, 110, 117  
 Fegley B., Lodders K., 1996, ApJ, 472, L37  
 Fegley B., Prinn R. G., 1985, ApJ, 299, 1067

Fletcher L. N., Swinyard B., Salji C., ve diğ., 2012, A&A, 539, id. A44  
 Guillot T., Atreya S., Charnoz S., ve diğ., 2009, Saturn from Cassini-Huygens, 745, Springer  
 Hubbard W. B., 1997, Science, 275, 1279  
 Hueso R., Guillot T., 2005, A&A, 442, 703  
 Jasper A.W., Klippenstein S.J., Harding L.B., ve diğ., 2007, Jour. Phys. Chem. A, 111, 3932  
 Kress M. E., Tielens A. G. G. M., 2001, Meteor. & Plan. Sci., 36, 75  
 Kroto H. W., Heath J. R., O'Brien S. C., ve diğ., 1985, Nature, 318, 162  
 Kunde V. G., Flasar F. M., Jennings D. E., ve diğ., 2004, Science, 305, 1582  
 Legerská, M., Chovanec, J., Chaus, A. S., 2006, Solid State Phenomena, 113, 559  
 Lewis J. S., Barshay S. S., Noyes B., 1979, Icarus, 37, 190  
 Lewis J. S., Prinn R. G., 1980, ApJ, 238, 357  
 Lewis J. S., 1974, Science, 186, 440  
 Lewis J.S., 2004, Physics and Chemistry of the Earth, Elsevier  
 Liang M.-C., Parkinson C. D., Lee A. Y.-T., ve diğ., 2003, ApJ, 596, L247  
 Lindal G. F., Lyons J. R., Sweetnam D. N., ve diğ., 1987, Jour. Geoph. Res, 92, 14987  
 Lodders K., Fegley B., 1999, Asymptotic Giant Branch Stars, IAU Symposium #191, LOC: 99-62044, 279  
 Lodders K., Fegley B., 2002, Icarus, 155, 393  
 Lodders K., 2003, ApJ, 591, 1220  
 Lunine J.I., 1993, Ann. Rev. A&A, 31, 217  
 Luszcz-Cook S. H., de Pater I., 2012, Icarus, 222, 379  
 Moriarty, J., Madhusudhan, N., & Fischer, D. 2014, ApJ, 787, 10  
 Moses J. I., Visscher C., Fortney J. J., ve diğ., 2011, ApJ, 737, id. 15  
 Moses J. I., Madhusudhan N., Visscher C., ve diğ., 2013, ApJ, 763, id. 25  
 Notsu, S., Eistrup, C., Walsh, C., ve diğ., 2020, MNRAS, 499, 2229  
 Pekmezci, G. S., Mousis, O., Lunine, J. I., 2020, ApJ, 904, id.129  
 Petigura E., Marcy G., 2011, Jour. Astroph., 735, id.41  
 Price, E. M., Cleaves, L. I., & Öberg, K. I. 2020, ApJ, 890, 154  
 Prinn, R. G., Barshay, S. S., 1977, Science, 198, 1031  
 Prinn R. G., Fegley B., 1981, ApJ, 249, 308  
 Prinn R. G., 1993, Protostars and Planets III, 1005  
 Roine A., 2006, HSC Chemistry 7.1 Commercial Package  
 Saumon D., Geballe T. R., Leggett S. K., ve diğ., 2000, ApJ, 541, 374  
 Semenov D., Hersant F., Wakelam V., ve diğ., 2010, A&A, 522, id.A42  
 Semenov, D., Favre, C., Fedele, D., ve diğ., 2018, A&A, 617, id.A28  
 Semenov D., Wiebe D., 2011, ApJ SS, 196, id.25  
 Simonelli D. P., Pollack J. B., McKay C. P., ve diğ., 1989, Icarus, 82, 1  
 Studier M. H., Hayatsu R., Anders E., 1968, Geoch. & Cosmoch. Acta, 32, 151  
 Tsang W., 1987, Jour. Phys. Chem. Ref. Data, 16, 471  
 Turrini, D., Schisano, E., Fonte, S., ve diğ., 2021, ApJ, 909, id.40  
 Visscher C., Moses J. I., Saslow S. A., 2010, Icarus, 209, 602  
 Visscher C., Moses J. I., 2011, ApJ, 738, id.72  
 Walsh, C., Herbst, E., Nomura, H., ve diğ., 2014, Faraday Disc., 168, 389  
 Walsh, C., Nomura, H., van Dishoeck, E., 2015, A&A, 582, id.A88  
 Wishnow E. H., Orton G. S., Ozier I., ve diğ., 2007, Jour. Quant. Spect. & Radi. Tra., 103, 102  
 Wong, M. H., Lunine, J. I., Atreya, S. K., ve diğ., 2008, RvMG, 68, 219  
 Yelle R. V., Herbert F., Sandel B. R., ve diğ., 1993, Icarus, 104, 38

## Access:

M22-0202: Turkish J.A&A — Vol.3, Issue 2.