

The influence of geometry on the FUV and X-ray driven chemistry in star formation

Doctoral Thesis

Author(s):

Bruderer, Simon

Publication date:

2010

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-006132657>

Rights / license:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#)

Diss ETH No. 19005

The influence of geometry on the FUV and X-ray driven chemistry in star formation

A dissertation submitted to

ETH Zurich

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by

Simon Bruderer

Dipl. Phys. ETH
born August 20, 1979
citizen of Herisau (AR)

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Arnold O. Benz, examiner
Prof. Dr. Michael R. Meyer and
Prof. Dr. Ewine F. van Dishoeck co-examiners

2010

Abstract

This thesis is devoted to the study of the chemistry in envelopes of young stars. Stars form in molecular clouds, composed of huge amounts of molecular gas and small dust grains. Gravitation contracts the cloud until protostars are born in the densest region of the cloud. Low-mass stars with masses similar to our sun slowly reach the main-sequence, while they disperse the cloud that gave birth to them by outflows, stellar winds and radiation. In this young phase, a planetary system surrounding the protostar may form. High-mass stars, with masses larger than about eight solar masses, reach the main-sequence while still deeply embedded in their natal cloud. Their luminosity may exceed 10000 times the solar luminosity. Due to their high surface temperature, most radiation is emitted at ultraviolet wavelengths. Also, strong X-ray radiation has been observed towards both low-mass and high-mass protostars. As the cloud collapses, angular momentum must be carried away to prevent the protostar from being disrupted by rotational forces. The observed fast outflows of molecular gas together with magnetic fields are believed to carry away the angular momentum. Outflows can etch large cavities into the envelope. If the shape of the cavity allows protostellar radiation to escape and to directly irradiate the envelope at the edge of the cavity a peculiar region is formed. These so called outflow-walls are characterized by a high temperature and strong far ultraviolet (FUV) radiation that can significantly alter the chemical composition. For example a large amount of simple molecules like light hydrides (OH , OH^+ , CH , CH^+ , SH , SH^+ , NH , NH^+) is found in the outflow-walls. The Herschel Space Observatory allows for the first time to study the infrared line radiation of light hydrides at sufficient angular and spectral resolution. In this work, we study the proposal of directly irradiated outflow walls by observations and numerical models. We concentrate on the study of the high-mass star forming region AFGL 2591, situated in the constellation of Cygnus at a distance of approximately 1 kpc (about 3000 light years).

In the introduction of the work (Chapter 1), we give a short review of star formation and the involved physical processes. In particular, we discuss the formation of low-mass and high-mass stars in the interstellar medium, the feedback of the protostar to its environment and the physical structure of a envelope surrounding a young star. The chemical reaction network, the formation of molecular lines and heating by continuum radiation is summarized. We discuss the foundations for numerical modelling of the processes.

In Chapter 2, we introduce a novel approach to model chemical abundances. We adopt a previously published computer code (Doty et al. 2002, 2004; Stauber et al. 2004, 2005) to calculate chemical abundances in gas with strong UV irradiation. The code is used to calculate a grid of

chemical abundances, consisting of about 100000 models. Abundances can then be quickly interpolated from this look-up table. This method is orders of magnitude faster than previous models and allows to study envelopes with a realistic multi-dimensional geometry rather than spherical symmetry, assumed in most previous models. The accuracy of the approach is verified and found to be very good with a mean deviation of 35 % to fully calculated models, very small in comparison with the uncertainties of the modeling. We find that cosmic-ray and X-ray driven chemistry is very similar, except for regions with very strong X-ray irradiation. This has the observational consequence that molecular tracers of X-rays are hard to distinguish from cosmic-ray ionization tracers.

A two dimensional axisymmetric model of the high-mass star forming region AFGL 2591 is introduced in Chapter 3, to study the proposal of directly irradiated outflow walls. Based on a density structure, constrained from observations (van der Tak et al. 1999), the far ultraviolet irradiation of the envelope is calculated using a Monte Carlo radiative transfer code that considers the scattering and attenuation by dust grains. The temperature of the gas is next calculated, self-consistently with the chemical abundances. The chemical abundances enter through the cooling rates, for example of the atomic fine structure line of ionized carbon (C^+ at $158 \mu\text{m}$). We obtain the chemical abundances with the method introduced in the previous chapter. Using the new model, we study the molecular emission of ionized carbon monoxide (CO^+). Synthetic maps of the emission are calculated and compared to observations. We find that the small layer of the outflow walls entirely dominates the molecular flux. The model explains both the detection with the JCMT single-dish telescope (Stäuber et al. 2007) and the non-detection in new data obtained with the Submillimeter Array interferometer.

Chapter 4 presents new observations of AFGL 2591 carried out using the Submillimeter Array. In combination with observations by Benz et al. (2007), we find emission of CS and HCN along the outflow region. The regions with molecular emission are spatially coincident, which are interpreted by a chemical model as dense and hot regions irradiated with FUV radiation. This is in agreement with the proposal of directly irradiated outflow walls.

A new method and computer code to model molecular line radiation is introduced in Chapter 5. Based on the escape probability approximation, it is much faster than other radiative transfer methods. The method is implemented to model line radiation of 1D spherical symmetric, 2D axisymmetric or 3D regions. We discuss a method to accelerate convergence, verify the code by different benchmark problems and study the accuracy of the method. We find good agreement with exact methods.

In Chapter 6, we extend the axisymmetric model of AFGL 2591 from Chapter 3, using a Monte Carlo radiative transfer method to self-consistently calculate the heating by dust continuum radiation. A grid of models with different shapes of the outflow cavity and protostellar properties is calculated. We find a relatively small dependence of the FUV irradiated and heated amount of gas depending on the cavity shape, as long as the geometry allows the FUV radiation to escape from the innermost region. However, the size of the warm region with temperatures above 100 K but without FUV irradiation depends strongly on the shape of the cavity. This region is important for molecules like for example water. The model is used together with the code for molecular line radiation from Chapter 5, to predict line fluxes of light hydrides that will be observed with the Herschel Space Observatory. We find that the emission of outflow wall enhanced species should be easily detectable.

Conclusions and an outlook on future work end the thesis (Chapter 7).

Zusammenfassung

Diese Dissertation widmet sich dem Studium der Chemie in Hüllen von jungen Sternen. Sterne entstehen in Molekülwolken, welche aus riesigen Mengen von molekularem Gas und kleinen Staubkörnern bestehen. Die Wolken werden durch die Gravitation kontrahiert, bis Protosterne in ihren dichtesten Regionen entstehen. Massearme Sterne (mit Masse ähnlich unserer Sonne) erreichen langsam die Hauptreihe, während ihre Ausflüsse, Sternwind und Strahlung, die Hülle, aus der sie geboren worden sind, auflösen. In dieser jungen Phase des Sternenlebens kann auch ein Planetensystem um den Stern gebildet werden. Massereiche Sterne (mit Massen grösser als ungefähr der achtfache Sonnenmasse) erreichen die Hauptreihe bereits, wenn sie noch tief in ihrer Hülle eingebettet sind. Die Leuchtkraft solcher Sterne kann stärker als die 10000 fache Sonnenleuchtkraft sein. Wegen ihrer hohen Oberflächentemperatur wird die meiste Strahlung im Ultravioletten emittiert. Bei massearmen und massereichen Protosternen wird starke Röntgenstrahlung beobachtet. Wenn die Hülle wegen der Gravitationskraft kollabiert, muss Drehmoment abgeführt werden, um den Stern vor dem Zerreißen durch Zentrifugalkräfte zu bewahren. Dies geschieht durch schnelle molekulare Ausflüsse in Kombination mit Magnetfeldern. Die molekularen Ausflüsse können grosse Hohlräume in die Hülle des Protosterns fressen. Sofern die Form dieser Hohlräume es zulässt, kann Strahlung vom Protostern entweichen und die Hülle am Rande der Hohlräume direkt bestrahlen, wodurch eine Region mit speziellen physikalischen Bedingungen entsteht. Diese sogenannten Ausflusswände sind durch eine hohe Temperatur und starke Bestrahlung im fernen Ultraviolet charakterisiert. Dadurch wird die chemische Zusammensetzung stark verändert. Zum Beispiel entsteht eine grosse Menge leichter Hydride (OH , OH^+ , CH , CH^+ , SH , SH^+ , NH , NH^+). Mit dem Weltraum-Teleskop "Herschel" können solche Hydride zum ersten Mal mit einer guten räumlichen und spektralen Auflösung beobachtet werden. In dieser Arbeit studieren wir das Szenario direkt bestrahlter Ausflusswände mit Beobachtungen und numerischen Modellen. Wir konzentrieren uns auf das massereiche Sternentstehungsgebiet AFGL 2591, das sich im Sternbild des Schwan in einer Entfernung von etwa 1 kpc (3000 Lichtjahre) befindet.

In der Einleitung zu dieser Arbeit (Kapitel 1) wird eine kurze Zusammenfassung der Sternentstehung und der beteiligten physikalischen Effekte gegeben. Wir besprechen die Entstehung von massearmen und massereichen Sternen in der Interstellaren Materie, die Rückkopplung des jungen Sterns auf seine Umgebung und die physikalische Struktur von Hüllen um Protosterne. Eine Zusammenfassung über chemische Reaktionen, molekulare Strahlungsprozesse sowie die Heizung durch Kontinuumstrahlung des Staubs wird ebenso gegeben. Die numerische Modellierung der besprochenen Prozesse wird kurz erläutert.

In Kapitel 2 wird eine neuartige Methode zur Modellierung von chemischen Häufigkeiten eingeführt. Wir passen ein zuvor publiziertes Computerprogramm (Doty et al. 2002, 2004; Stäuber et al. 2004, 2005) an, um chemische Häufigkeiten in Regionen mit starker Bestrahlung im fernen Ultraviolett zu berechnen. Mit dem Programm wird eine Tabelle von chemischen Häufigkeiten angelegt, welche aus etwa 100000 Einträgen besteht. Die Häufigkeiten können dann aus dieser Tabelle interpoliert werden. Die vorgestellte Methode ist wesentlich schneller als frühere Rechnungen. Dies erlaubt Hüllen mit realistischer Geometrie zu berechnen und nicht nur Modelle in sphärischer Symmetrie wie in früheren Arbeiten. Wir verifizieren die Genauigkeit der Interpolationsmethode und finden mittlere Abweichungen von 35 %, was sehr klein ist im Vergleich zu den Unsicherheiten der Modellrechnung. Wir finden sehr kleine Unterschiede in der Chemie von Regionen mit Röntgenbestrahlung im Vergleich mit Regionen wo kosmische Strahlen (Protonen, α -Teilchen) wirken. Dies bedeutet, dass diese Regionen durch Beobachtung schwer unterscheidbar sind.

In Kapitel 3 wird ein zweidimensionales Modell des massereichen Sternentstehungsgebiets AFGL 2591 konstruiert, damit das Szenario von direkt bestrahlten Ausflusswänden studiert werden kann. Wir nehmen Achsensymmetrie an. Das Modell basiert auf einer Dichtestruktur, die durch Beobachtungen gewonnen wurde (van der Tak et al. 1999). In einem ersten Schritt wird die Ultraviolett-Strahlung in der Hülle mit einem Monte-Carlo Strahlungstransport-Programm berechnet, unter Berücksichtigung von Streuung und Absorption durch Staub. Die Gas-Temperatur wird dann selbstkonsistent mit den chemischen Häufigkeiten berechnet. Dies ist nötig, da die Kühlungsraten von den Häufigkeiten abhängen. Ein wichtiges Beispiel für einen Kühlungsprozess ist die atomare Feinstruktur-Linie von ionisiertem Kohlenstoff, die bei $158 \mu\text{m}$ strahlt. Mit dem neuen Modell studieren wir die molekulare Strahlung von ionisiertem Kohlenstoff-Monoxid (CO^+). Karten (Bilder) der molekularen Emission werden simuliert und mit Beobachtungen verglichen. Wir finden, dass alle Strahlung des Moleküls aus der dünnen Schicht der Ausflusswänden kommt. Unser Modell erklärt die von Stäuber et al. (2007) mit dem JCMT Teleskop beobachtete Emission des Moleküls. Es kann aber auch erklären, wieso in neu durchgeführten Beobachtungen mit dem Submillimeter Array Interferometer das Molekül nicht detektiert wurde.

Kapitel 4 stellt neue Beobachtungen von AFGL 2591 vor, welche mit dem Submillimeter Array durchgeführt wurden. Die Beobachtungen wurden mit jenen von Benz et al. (2007) kombiniert. Wir finden Strahlung von CS und HCN entlang der Ausfluss-Region. Die Strahlung der beiden Moleküle ist räumlich korreliert. Mit einer Modellrechnung können wir diese Korrelation als Region mit heissem und dichtem Gas unter starker UV-Bestrahlung deuten. Diese Beobachtung stimmt mit dem Vorschlag der direkt bestrahlten Ausflusswänden überein.

Kapitel 5 bespricht eine neue Methode zur Berechnung von molekularer Linienemission und ihre Implementierung als Computerprogramm. Die Methode geht von der “Escape-Probability” Approximation aus und ist wesentlich schneller als andere Rechenmethoden. Die Methode wird implementiert, um sphärisch symmetrische, achsensymmetrische oder beliebige dreidimensionale Probleme zu lösen. Wir besprechen eine Technik, um die Konvergenz der Methode zu beschleunigen. Der Code wird mit verschiedenen Test-Problemen verifiziert. Wir finden eine gute Übereinstimmung der Resultate mit jenen einer Rechnung ohne Approximationen.

In Kapitel 6 wird das achsensymmetrische Modell aus Kapitel 3 mit einem Strahlungstransport Code erweitert, um die Heizung durch die Staubkontinuum-Strahlung selbstkonsistent zu berechnen. Eine Anzahl Modelle mit verschiedenen Formen der Ausfluss-Kavität und verschiedenen Eigenschaften des jungen Protosterns wird berechnet. Wir finden eine relativ kleine Abhängigkeit der warmen Masse mit starker UV-Bestrahlung von der Form, solange die Form das Entweichen der Strahlung aus dem innersten Teil zulässt. Die Grösse der warmen Region ohne starke UV-Bestrahlung hängt hingegen stark von der Form ab. Diese Region ist wichtig, da eine grosse Menge Wasser in ihr entstehen kann. Die Modelle werden zusammen mit dem Strahlungstransport-Code aus Kapitel 5

benutzt, um Linienflüsse von leichten Hydriden zu berechnen, welche mit dem Weltraum-Teleskop “Herschel” beobachtet werden. Wir finden, dass die in den Ausflusswänden verstärkten Spezies leicht detektierbar sein sollten. Die Arbeit schliesst mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick auf mögliche zukünftige Arbeiten (Kapitel 7).

Zürich, im März 2010

Simon Bruderer