



评述

星际 C_{60} 李琼^①, 李爱根^②, 姜碧涛^③, 向福元^①, 钟建新^{①*}^① 湘潭大学材料与光电物理学院, 湘潭 411105;^② 密苏里大学物理与天文学系, 哥伦比亚 65211, 美国;^③ 北京师范大学天文系, 北京 100875

*联系人, E-mail: jxzhong@xtu.edu.cn

收稿日期: 2012-11-27; 接受日期: 2013-04-22

国家自然科学基金资助项目(批准号: 11173019)

摘要 C_{60} 的发现起源于人们对星际尘埃的探索, 肇始于 1985 年由 Kroto 等人首次在实验室合成, 25 年后最终于 2010 年在星际空间被探测到. 近几年天文工作者在多种星周、星际环境观测到 C_{60} . 本文综述了与天文观测和理论密切相关的 C_{60} 的有关物理性质; 介绍了 C_{60} 在星际空间中的观测特性; 最后讨论了 C_{60} 在星际空间的形成与激发机制.

关键词 C_{60} , 星际介质, 星际尘埃, 红外辐射

PACS: 98.38.-j, 98.58.-w

doi: 10.1360/132012-963

1 引言

在银河系和河外星系的恒星之间并不是空无一物的真空, 而是充斥着总量占星系质量约 10% 的气体(原子, 分子和离子)和尘埃(微小的固体微粒). 尘埃的矿物学组成包含了尘埃的产生和演化等重要信息, 反映了星际空间的物理化学性质, 以及尘埃本身的演化过程. 尘埃在天体物理中的重要意义主要体现在四个方面: (1) 减弱星光, (2) 恒星、行星形成的基石, (3) 星际气体(如 H)的加热, (4) 星际分子(如 H_2)的形成. C_{60} 是星际物质的成分之一.

天文学家对于星际问题尤其是星际尘埃的研究, 导致了 C_{60} 分子的最终发现. 1963 年, 在碳弧(一个碳电极和其他材料之间的电弧)中检测出 C_{33} 分子^[1]. 美

国迈阿密大学的 Schultz^[2]对 C_{60} 分子结构的可能性进行了数学模型上的探索. 70 年代初, 日本和前苏联的学者都曾预测可能存在 C_{60} 分子^[3,4]. Rohlfiing 等人^[5]发现: 低于 200 个的碳原子可以组合形成 C_n , 且这种原子簇中 n 大于 40 时只能是偶数, 并发现 C_n 中 $n=60$ 和 $n=70$ 时的质谱峰特别突出, 说明 C_{60} 和 C_{70} 相对于其他 C_n 原子簇更加稳定.

20 世纪 80 年代, 英国 Sussex University 的 Kroto 教授等人^[6]致力于星际弥散带(Diffuse Interstellar Bands)的研究工作, 尤其是富碳尘埃的研究. 在此期间, Kroto 观测到星际尘埃云中有 HC_nN ($n<15$)分子, 决定深入对星际中这种分子的形成机制进行研究. 1984 年, Kroto 到 Rice University 访问, 结识了两位美国著名的研究原子团簇的专家, Curl 教授和

引用格式: 李琼, 李爱根, 姜碧涛, 等. 星际 C_{60} . 中国科学: 物理学 力学 天文学

Li Q, Li A G, Jiang B W, et al. Interstellar C_{60} (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, doi: 10.1360/132012-963

Smalley 教授, 三人通过一系列的讨论后, 决定在 1985 年对 Kroto 发现的 HC_nN 分子的形成机制进行深入的合作研究. 实验中, 他们在石墨表层采用高功率的激光束轰击, 使其气化后, 再用氦气产生的超声波脉冲把这些被气化的碳原子通过一个小的喷嘴吹入真空室中, 让其在真空室中进行激烈的热碰撞反应, 一段时间后, 迅速冷却就得到了新的碳原子簇. 他们观察质谱上显示的结果, 发现 C_{60} 分子信号的丰度与临近信号丰度相比显得特别突出, 将近是其 40 倍, 另一个比较突出的是 C_{70} 分子的信号. 从原子团簇稳定性的角度来分析, 可以得出这两种分子都是相当稳定的. 随后, Kroto 等人^[6]很快就勾画出了 C_{60} 分子的结构, 主要是建筑学家 Buckminster Fuller 用五边形和六边形构成薄壳建筑结构(凸多面体)的启示起了关键性作用, Kroto 等人为了纪念 Buckminster Fuller, 一致同意在其名字后加-ene, 即 Buckminsterfullerene(富勒烯), 用来命名这一新发现的碳原子团簇. Kroto, Smalley 与 Curl 一起, 因发现碳元素的第三种存在形式—— C_{60} (又称“富勒烯”, “巴基球”), 而获 1996 年诺贝尔化学奖.

1990 年, Kratschmer 等人^[7]提出了低压氦气环境下石墨电极电弧放电法合成富勒烯的方法能够得到克量级的固态 C_{60} . 在氦气环境下, 用石墨作电极并进行通电, 一段时间后得到相应的石墨蒸气, 然后进行冷却就可以得到部分的混合物烟炱, 其中含有 5%–10% 的 C_{60} 分子和 C_{70} 分子. Kratschmer 等人利用重结晶和液相色谱法将这两种分子分离, 获得了纯 C_{60} 分子和 C_{70} 分子. 通过紫外/可见光谱, 红外光谱等各种物理方法对 C_{60} 分子和 C_{70} 分子的结构进行分析, 他们得出: C_{60} 分子是球笼状, C_{70} 分子是橄榄球笼状, 和 Kroto 等人发现富勒烯家族时的推测结果完全一致. 随后的大量研究均表明存在一个稳定的富勒烯家族, 从而确认了碳除了金刚石和石墨, 还具有第三种形式的同素异形体. 值得指出的是, Kroto 等人^[6]和 Kratschmer 等人^[7]主持的实验, 均属贫氢环境, 没有氢的参与.

本文第 2 节简要介绍了 C_{60} 的有关物理性质; 第 3 节概述了星际 C_{60} 的天文观测: 分析了星际 C_{60} 的早期探索, 比较详细地综述了最近两年在星际空间 C_{60} 的观测发现; 在第 4 节我们简要讨论了星际 C_{60} 的形成和振动激发机制; 最后在第 5 节我们对星际 C_{60} 研究的重点问题作了展望, 并概要介绍了我们自己的

工作.

2 与天文观测和理论有关的 C_{60} 物理特性

C_{60} 在室温下为紫红色固态分子晶体, 有微弱荧光, 分子直径约为 $7.1 \text{ \AA}$, 密度是 1.68 g/cm^3 ^[7]. C_{60} 分子中的五元环具有较强的顺磁性, 六元环具有缓和的介磁性, 整个 C_{60} 球体中的磁性是中性的^[8]. C_{60} 在常温下通常不导电, 因为 C_{60} 的体积较大, 中间为真空, 所以可将很多原子放进它的内部, 就可影响其导电性.

由于 C_{60} 分子具有高度对称的球形空间结构, 且存在离域的大共轭 π 键(在多原子分子中如有相互平行的 p 轨道, 它们连贯重叠在一起构成一个整体, p 电子在多个原子间运动形成 π 型化学键, 这种不局限在两个原子之间的 π 键称为离域 π 键, 或大 π 键), 由此我们可以推测, 它应具有芳香族化合物的相关性质. 通常情况下, 芳香族物质表现出富电子反应性(在反应中容易失去电子的特性), 但在 C_{60} 的实验中却得到了相反的结果, 倾向于得到电子^[9]. C_{60} 分子具有不饱和性, 又是一个好的电子接受体, 不易失电子^[10–12].

从原子簇的结构来看, C_{60} 分子的每一个顶点上都可以被氢加成, 生成新物质 $C_{60}H_{60}$, 实际上, 如果已经制得 $C_{60}H_{60}$, 其表面的 60 个氢原子之间将存在强相互作用, 是极不稳定的, 因此, 至今都还没有在实验室中制得. 1990 年, Haufler 等人^[13]制得了到目前为止 C_{60} 分子的最高氢化物: $C_{60}H_{36}$, 他采用的是还原方法. 随后 1993 年, Smith 等人^[14]制得了 1,2- $C_{60}H_2$ 和 1,6- $C_{60}H_2$, 采用 C_{60} 与重氮甲烷反应, 再进行热解, 这是最简单氢化物 $C_{60}H_2$ 的制备方法, 还有其他许多种方法.

固态 C_{60} 的紫外/可见/近红外吸收光谱^[15,16]如图 1 所示. 由于在带隙(Band Gap)外(可见光和近红外波段) C_{60} 的吸收比较弱, 使得测量变得不准确, 特别是固态 C_{60} 表面的散射会影响对可见光和近红外波段吸收的测量. C_{60} , C_{70} 的红外光谱、拉曼光谱和紫外/可见光电子谱的谱峰的实测值如表 1 所示^[17]. 光电子谱中的符号: ϵ —摩尔吸光系数, s—强, w—弱, mw—中弱, b—宽带. 值得注意的是, 这些结果与测量环境(如是真空或置于某种基体)有关.

图 2 画出了 C_{60} 分子和 C_{60} 带有不等量负电荷 C_{60}^- , C_{60}^{2-} , C_{60}^{3-} , C_{60}^{5-} 的红外振动频率^[18], 从图中可以看

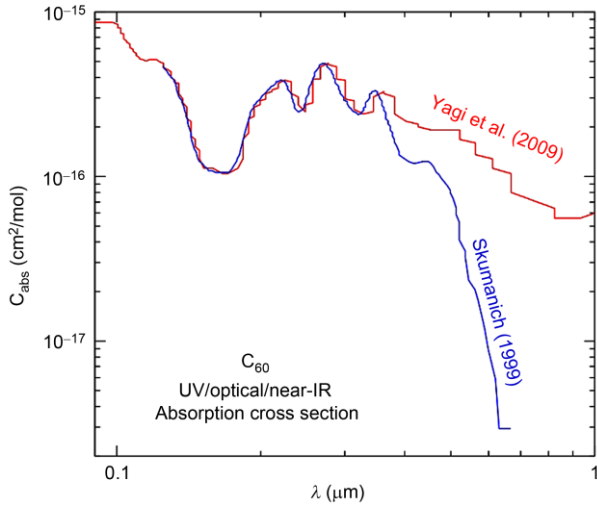


图 1 (网络版彩图) 固态 C_{60} 的紫外/可见/近红外吸收光谱图 文献[15]采用“光热偏转光谱法”(Photothermal Deflection Spectroscopy)测量 C_{60} 的吸收强度, 最大程度地消除了固态 C_{60} 表面散射对可见光和近红外波段的吸收测量的影响. 因此, 文献[15]测得的可见光/近红外吸收强度比文献[16]要小很多. 图采自文献[15,16]

Figure 1 (Color online) Ultraviolet, optical and near-infrared absorption cross sections of solid C_{60} . Ref. [15] took the photothermal deflection spectroscopy technique to measure the absorption of C_{60} . This largely eliminated the effects of the light scattering at grain boundaries on the visible/near-infrared absorption of C_{60} . Taken from refs. [15,16].

表 1 波谱峰值^[17]

Table 1 Peak positions of the vibrational, Raman and electronic bands of C_{60} and C_{70} . Taken from ref. [17]

波谱	分子	峰位
红外光谱	C_{60}	1430 cm^{-1} , 1182 cm^{-1} , 577 cm^{-1} , 527 cm^{-1}
	C_{70}	1700 cm^{-1} , 1431 cm^{-1} , 1414 cm^{-1} , 1086 cm^{-1} , 796 cm^{-1} , 674 cm^{-1} , 578 cm^{-1} , 534 cm^{-1}
拉曼光谱	C_{60}	1469 cm^{-1} , 497 cm^{-1} , 273 cm^{-1}
紫外/可见光电	C_{60}	213 nm (s, $\epsilon=135000$), 257 nm (s, $\epsilon=175000$), 329 nm (s, $\epsilon=51000$), 404 nm (w), 440–470 nm (b)
	C_{70}	214 nm (s), 236 nm (s), 331 nm (mw), 360 nm (mw), 378 nm (mw), 440–670 nm (b, mw)

出, 在高频段(1400 cm^{-1} 处附近), C_{60}^- 的红外谱相对 C_{60} 分子的红外谱明显向低频方向移动; 而在低频段, C_{60}^- 的红外振动频率与 C_{60} 分子的红外振动频率相似^[18]. 曲线 C_{60}^- 与另外 3 条曲线 C_{60}^{2-} , C_{60}^{3-} , C_{60}^{5-} 相比, 相对曲线 C_{60} 有几乎相同的变化趋势, 不难看出, 随着 C_{60} 所带负电荷量的增多, C_{60} 的红外振动频率“红移”幅度增大, 相对强度也略有增加^[18].

C_{60} 带有不等量正电荷时和 C_{60} 分子的红外吸收谱如下图 3 所示, 从图中可以看出: 当 C_{60} 失去电荷

时, C_{60} 的红外振动频率向低频方向移动. 与图 2 所示的 C_{60} 接受电荷时振动频率的变化趋势几乎相同^[18]. 这说明一个中性分子, 在接受电荷或失去电荷后, 其振动频率有可能会出现软化现象^[18].

Gasyna 等人^[19]和 Fulara 等人^[20]分别测量了置于稀有基体(Rare Matrices)中 C_{60}^+ 的吸收谱, 结果显示, 当稀有基体为氩时, C_{60}^+ 吸收的主峰为(9724 $\pm$ 4) Å; 当稀有基体为氖时, C_{60}^+ 吸收的主峰为(9580 $\pm$ 4) Å 和(9642 $\pm$ 4) Å. 且 Fulara 等人^[20]从实验中测量到 C_{60}^+ 具有 7.11 μm 和 7.51 μm 红外发射谱, 但 Moutou 等人^[21]在星际空间中却没有观测到 C_{60}^+ 的红外谱.

1993 年, Wunderlich 等人^[22]用差示扫描量热法(DSC), 研究了 C_{60} 的热力学性质, 得出在 256 K 时

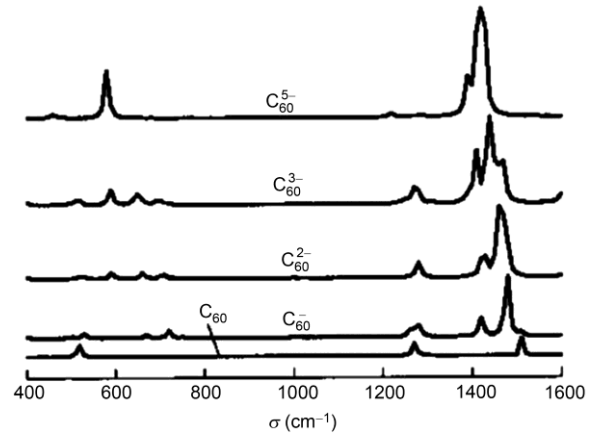


图 2 带有不等量负电荷的 C_{60} 红外谱. 图采自文献[18]

Figure 2 Infrared spectra of negatively charged C_{60} . Taken from ref. [18].

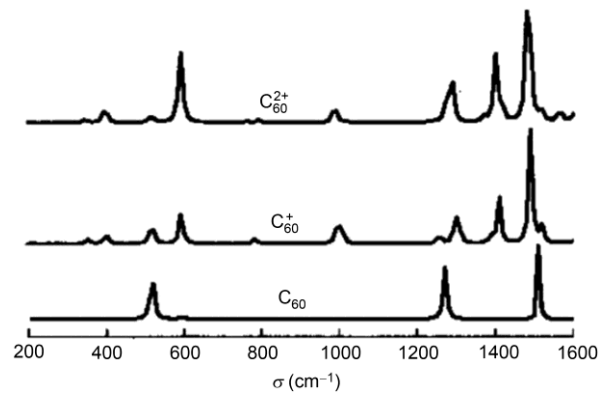


图 3 带有不等量正电荷的 C_{60} 红外谱. 图采自文献[18]

Figure 3 Infrared spectra of neutral C_{60} , C_{60} cation and C_{60} dication. Taken from ref. [18].

C_{60} 发生相变, 焓为 $27.3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$, 其原因是 C_{60} 由玻璃形态向晶体形态转变, 这是一种典型的由无序向有序的转变. 由热力学性质可知, 碳单质稳定性顺序为: 石墨 > 金刚石 > 富勒烯^[23].

3 C_{60} 在星际空间中的观测记录

科学家对星际问题尤其是星际尘埃成分组成的探索, 导致了后来 C_{60} 的发现, 以及最终在星际空间探测到 C_{60} .

1930年Trumpler通过对星际消光、红化的研究, 第一次证实了星际尘埃的存在, 这个在星际尘埃研究史上具有划时代意义的重要发现开拓了现代尘埃天体物理学的研究之路.

随着仪器设备的不断更新, 观测技术的进步, 以及实验测量的发展和对固体颗粒物理化学性质认识的提升, 人们对星际尘埃的认识也越来越清晰. 目前, 人们对星际尘埃的化学组成, 尺寸和形状等的认识, 主要依赖于观测它与周围辐射场的相互作用. 可以作为直接观测证据的有: 星际消光、星际红外辐射、星际散射和星际偏振; 可作为间接的证据有: 星际元素减损. 这些重要的观测证据为研究星际尘埃的各种性质提供了限制条件^[24].

3.1 星际 C_{60} 的早期探测

自从 Kroto 等人在实验室发现 C_{60} 分子以来, 在宇宙中对富勒烯的搜索就开始了. 在他们那篇发现 C_{60} 的 *Nature* 论文中, Kroto 等人^[6]推测: “由于 C_{60} 是在最恶劣环境下形成的稳定分子, 因而 C_{60} 可能广泛的分布在宇宙中. 它可能是富碳星周尘埃包层的主要成分, 也可能是星际尘埃的一种成分, C_{60} 及其衍生物也可能是星际弥散带(Diffuse Interstellar Bands, DIBs) 的载体.” 在宇宙空间搜索 C_{60} 以及其他富勒烯的工作, 早期主要集中在紫外和可见光波段, 寻找其电子跃迁谱线, 同时, 寄希望于 C_{60} 可以解释一直没有得到认证的 DIBs. 不过, 在这些波段的搜索不是非常成功.

C_{60} 具有较低的电离能, 一级电离能是 7.61 eV , 二级电离能是 11.39 eV , 所以 C_{60} 在星际空间最可能以离子的形式存在. 1988年, Snow等人^[25]在星际空间和演化晚期恒星的尘埃包层对 C_{60} 进行了搜寻, 提出 DIBs 可能是电离多面体的碳分子(如 C_{60}^+)形成的.

Leger 等人^[26]也提出 C_{60}^+ 及其他电离的多面体碳分子可能是 DIBs 的载体. Foing 和 Ehrenfreund^[27]提出, C_{60} 离子 C_{60}^+ 可能是 DIBs 9577 Å 和 9632 Å 的载体, 因为它们的波长和带宽与实验室测得的 C_{60}^+ 的波长与带宽比较接近. 他们由此得到 C_{60}^+ 的丰度为 C 丰度的 0.3%–0.9%. 不过, 把这两个 DIBs 带归结为 C_{60}^+ 的观点仍有争论^[28,29].

除了可见光和紫外波段, 对 C_{60} 分子的搜寻也在红外波段进行, 不幸的是, 在斯必泽太空望远镜(Spitzer Space Telescope, 后文简用 Spitzer)之前, 这些搜寻也不太成功.

Clayton 等人^[30]在富碳贫氢的 RCB 型恒星(北冕座 R 型变星)搜索 C_{60} 在 $8.5 \mu\text{m}$ 处的发射特征, 他们用的是 NASA (美国国家宇航局) IRTF (Infrared Telescope Facility) 的 IRSHELL 中红外光谱仪. 虽然富碳贫氢的环境与实验室合成 C_{60} 分子的条件非常一致, 却没有看到这个特征. 后来, Garcia-Hernandez 等人^[31]预测, 在适度缺氢的星周包层, 通过分解无定形碳可以形成 C_{60} , 而在极度缺氢的 RCB 恒星周围, C_{60} 的形成效率是很低的. 因而, RCB 恒星不是搜索 C_{60} 的理想天体.

Moutou 等人^[21]用欧洲的红外空间天文台(Infrared Space Observatory, ISO) 的短波光谱仪(Short Wavelength Spectrometer, SWS) 获得了反射星云 NGC 7023 波长为 $7.0\text{--}8.7 \mu\text{m}$ 的 ISO-SWS 光谱, 其目的是希望看到 C_{60} 在 $7.0 \mu\text{m}$ 和 $8.5 \mu\text{m}$ 以及 C_{60}^+ 在 $7.1 \mu\text{m}$ 和 $7.5 \mu\text{m}$ 处的振动带, 但这一努力也失败了. 他们估算了 C_{60} 和 C_{60}^+ 的丰度上限为 0.26% 和 0.27%. 有意思的是, NGC 7023 最近被 Sellgren 等人^[32]检测到了 C_{60} 分子. 之所以 Moutou 等人^[21]未在 NGC7023 探测到 C_{60} , 是因为其观测方位的 C_{60} 发射极其微弱.

Nuccitelli 等人^[33]使用 NASA IRTF 上的 TEXES 光谱仪在三个高消光的分子云(AFGL 2136, AFGL 2591 和 NGC 7538 IRS1)中搜寻 $8.5 \mu\text{m}$ 的特征, 也没有检测到.

有趣的是, Volk 等人^[34]通过对恒星演化末期阶段的含碳物质的化学变化进行了分析, 在前行星状星云(Pre-Planetary Nebulae, PPN) IRAS 07134+1005 的 ISO-SWS 光谱中探测到 $17.85 \mu\text{m}$, $18.9 \mu\text{m}$ 和 $19.1 \mu\text{m}$ 谱征, 他们认为其载体应具有较大的芳香性,

应是具有较高对称结构的有机分子,同时预测这种分子在恒星的演化过程中只能存在几千年.

值得指出的是,早在 1992 年,美国科学家 Buseck 等人^[35]通过高分辨率透射电镜,分析了俄罗斯一个前寒武纪岩石(Precambrian Rocks),首次发现了天然存在的 C_{60} 和 C_{70} ,并通过飞行时间质谱证明了其结论,但产生原因未知. Zinner 等人^[36]在陨石中研究了前太阳时期的各种尘埃(如 SiC),预言 C_{60} 是在前太阳时期合并入彗星或小行星的,从而能够在陨石中探测到. 1999 年,Becker 等人^[37]在 Allende 陨石中检测到 C_{60} , C_{70} 和其他富勒烯分子. 2005 年, Rietmeijer 等人^[38]用高分辨透射电镜和拉曼显微光谱学等方式,分析行星际尘埃(IDPs)和碳质球粒状陨石时,也发现有 C_{60} 的存在.

3.2 C_{60} 在星际空间中的最终证实

情况在 Spitzer 的观测之后有了不同,基于 Spitzer 的 IRS (Infrared Spectrograph, 红外摄谱仪)拍摄的光谱,近两年来天文学家们在多种天体环境下都发现了 C_{60} 分子. 第一次对于 C_{60} 准确无误地探测是在行星状星云 Tc1 的 Spitzer/IRS 光谱中, Cami 等人^[39]于 2010 年发现了 C_{60} 在 $7.0\ \mu\text{m}$, $8.5\ \mu\text{m}$, $17.4\ \mu\text{m}$ 和 $18.9\ \mu\text{m}$ 处的振动带,同时,也看到了 C_{70} 分子在 $12.6\ \mu\text{m}$, $14.9\ \mu\text{m}$ 和 $15.6\ \mu\text{m}$ 处的振动带. Sellgren 等人^[32]也随之在反射星云 NGC 7023 和 NGC 2023 的 Spitzer/IRS 光谱中证认出 C_{60} 分子,这是第一个星际 C_{60} 分子的发现. 随后, C_{60} 分子在各种天体环境(如反射星云、前行星状星云、行星状星云、Herbig Ae/Be 星和年轻恒星天体等)均被探测到,其 C_{60} 的丰度在总碳丰度的 0.1%–1.5% 之间.

(i) 行星状星云 Tc1

渐近巨星分支(AGB),是赫罗图上低质量至中等质量恒星在演化晚期聚集的区域. AGB 星在星际空间中具有重要作用,因为它可以产生大量的星际尘埃,同时也是行星状星云形成的前奏. Tc1 是一颗年轻的低激发态行星状星云,由恒星晚年抛出的物质组成,其中央部分有一颗致密,高温的白矮星,这其实是当初那颗巨大的恒星抛射物质之后留下的残骸,其星光照射使行星状星云发光. Spitzer/IRS 光谱表明, Tc1 内部富碳,贫氢和多尘埃.

2010 年, Cami 等人^[39]通过 Spitzer 空间望远镜红外光谱仪,得到了 Tc1 的光谱(如图 4),其光谱显示了

行星状星云在低密度气体环境下具有典型的大量而狭窄的禁戒发射线. 对于富碳环境,连续谱归因于无定形碳(Amorphous Carbon)尘埃颗粒.

如图 4 所示,经过扣除连续谱,禁线,以及 SiC 发射特征的 Spitzer/IRS 光谱明显可见波长为 $7.0\ \mu\text{m}$, $8.5\ \mu\text{m}$, $17.4\ \mu\text{m}$, $18.9\ \mu\text{m}$ 的 C_{60} 红外振动谱带,同时也有一些较弱的谱线特征,与实验室测得的 C_{70} 光谱相吻合. Cami 等人把天文观测 C_{60} 光谱与实验室测得的进行对比,结果完全一致. Cami 说:“这种结果完全出乎我们的意外,同时也在我们的意料之中,因为当我们看到光谱上的谱线时,我立马就意识到这是我们一直以来在星际中不断寻找的 C_{60} 分子.”^[39]曾发现 C_{60} 的 Kroto 得知这一消息后说:“这一令人兴奋的发现证实了我长久以来的猜测,富勒烯一直以来就存在于我们星系幽暗的角落里.”^[32]

Cami 等人认为,与实验室合成 C_{60} 的环境非常类似, Tc1 的星周环境是富碳贫氢的,其中 C 与 O 的比例是 3.2:1. 他们认为,在这样的区域发现 C_{60} 和 C_{70} 并非偶然. 在多碳的环境中,氢的含量决定了合成物的化学路径是趋向于多环芳香烃(Polycyclic Aromatic Hydrocarbon, PAH)分子还是富勒烯.

(ii) 反射星云 NGC 7023

Sellgren 等人^[40]在 2007 年通过 Spitzer/IRS, 在

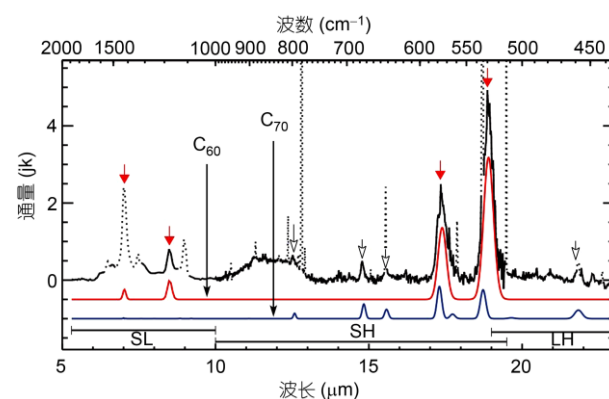


图 4 (网络版彩图)行星状星云 Tc1 扣除连续谱后 5–23 μm 的 Spitzer/IRS 光谱. 其中实心箭头标志的是 C_{60} 红外振动谱带,而空心箭头标示的是 C_{70} 的红外振动谱带. 图下端分别是 C_{60} 和 C_{70} 的红外振动谱带在 330 K 和 180 K 下的热发射模型. 图采自文献[39]

Figure 4 (Color online) Continuum-subtracted 5–23 μm Spitzer/IRS spectrum of Tc1, a planetary nebula. Solid (hollow) arrows label the infrared vibrational bands of C_{60} (C_{70}). The lines under the Spitzer/IRS spectrum of Tc1 show the thermal emission models of C_{60} and C_{70} at temperature $T=330\ \text{K}$, $180\ \text{K}$, respectively. Taken from ref. [39].

NGC 7023 上探测到波长范围为 15–20 μm 的星际发射光谱. 他们发现 NGC 7023 在 15.9 μm , 16.4 μm , 17.0 μm , 17.4 μm , 17.8 μm 和 18.9 μm 处有星际发射特征, 且提出在 18.9 μm 处的发射谱特征可能归因于富勒烯和多环芳香烃.

2010 年, Sellgren 等人^[32]在 NGC 7023 上探测到了 C_{60} 的 4 条红外振动跃迁谱线: 7.0 μm , 8.5 μm , 17.4 μm 和 18.9 μm (图 5). 他们认为, 波长为 17.4 μm 和 18.9 μm 的两条谱线和 2007 年的探测结果一致. 他们估算, 在反射星云 NGC 7023 上, C_{60} 占星际碳的 0.1%–0.6%. Sellgren 等人的这次发现, 是 C_{60} 在星际空间的首次观测证实.

(iii) 最近观测结果

近两年来, C_{60} 在广袤的各种天体物理环境中不断的被检测出来, 其丰度大约占星际碳总丰度的 0.1%–1.5%.

在中小质量恒星演化晚期的前行星状星云和行星状星云中检测到了 C_{60} 分子. 首先是 Garcia-Hernandez 等人^[41]在银河系的 3 个行星状星云和小麦哲伦

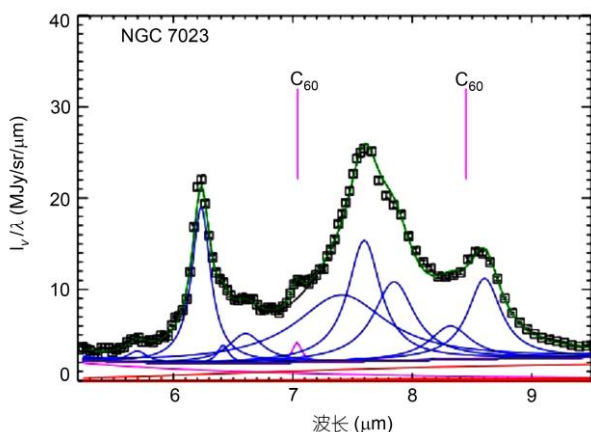


图 5 (网络版彩图)发射星云 NGC 7023 上 5–9 μm 的 Spitzer/IRS 光谱

C_{60} 的 7.04 μm 和 8.5 μm 发射线用竖直线标出. 多环芳香烃分子 (PAH) 的 6.2 μm , 7.7 μm , 8.6 μm 发射线(及其一些较弱的谱线如 5.3 μm , 5.7 μm , 6.4 μm , 6.7 μm , 7.4 μm 和 8.3 μm) 用 Drude 轮廓表示(其 7.7 μm 发射线由 7.6 μm 和 7.8 μm 两个 Drude 轮廓表示). 图采自文献[32]

Figure 5 (Color online) Spitzer/IRS spectrum of NGC 2023, a reflection nebula. The vertical lines label the 7.04 and 8.5 μm emission features of C_{60} . The 6.2 μm , 7.7 μm , 8.6 μm features (as well as the weaker features at 5.3 μm , 5.7 μm , 6.4 μm , 6.7 μm , 7.4 μm , and 8.3 μm) of PAHs are approximated as Drude profiles. Note that the 7.7 μm feature is a combination of two Drude profiles at 7.6 μm and 7.8 μm . Taken from ref. [32].

云的一个行星状星云中, 探测到了 C_{60} 分子, 同时还有 PAH 和非常小的无定形碳尘埃颗粒. 随后, Garcia-Hernandez 等人^[42]证认了另外 5 个 SMC (Small Magellanic Cloud, 小麦哲伦星云) 和 5 个 LMC (Large Magellanic Cloud, 大麦哲伦星云) 中的行星状星云具有 C_{60} 和 C_{70} 分子, 这些源的红外光谱呈现出复杂的特征, 包括脂肪族和芳香族的分子, 如 HAC (Hydrogenated Amorphous Carbon, 氢化无定形碳)、PAH 团簇、富勒烯和比较小的脱氢碳团簇(可能是平面的 C_{24}). Zhang 等人^[43]在前行星状星云上探测到了 C_{60} . 在 IRAS 01005+7910 上, 他们用 Spitzer 红外光谱仪发现 C_{60} 在 7.0 μm , 17.4 μm 和 18.9 μm 的振动跃迁光谱. 由此, 他们提出: 富勒烯形成于渐近巨星支 (AGB 星) 之后但在行星状星云之前这一简短的恒星演化阶段.

此外, Garcia-Hernandez 等人^[31]对大量的 RCB 恒星搜索过 C_{60} 分子谱特征, 只在 DY Cen 中看到了 C_{60} (和 PAH) 分子, V854 Cen 可能有 C_{60} 分子, 它们都是贫氢的 RCB 恒星(但这两个源在 RCB 类恒星里相对来说是不那么贫氢的).

人们还在双星系统中检测到了 C_{60} 分子. Gielen 等人^[44,45]在两个双星 post-AGB 星的富氧星周环境中证认出 C_{60} 分子, 以及 PAH 和硅酸盐分子. Evans 等人^[46]在一个特殊的双星系统, XX Oph 中探测到了处于 7.01 μm , 17.25 μm 和 18.99 μm 处的特征, 他们认为这是由固相 C_{60} (而不是气相 C_{60} 分子) 产生的, 因为其 17.25 μm 观测特征更接近固相 C_{60} 的 17.3 μm 特征, 而不是气相在 17.53 μm 处的特征. 不过, 应当指出, C_{60} 分子的振动谱带的波长和宽度是与温度有关的.

此外, 在星际介质中也检测到了 C_{60} 分子. Rubin 等人^[47]在猎户星云的“Veil”区域检测到了 C_{60} 分子. Roberts 等人^[48]在如下天体中检测到了 C_{60} 分子: 处于银河系的中央分子区 (Central Molecular Zone) 的两个 YSO (Young Stellar Object, 年轻恒星天体) 和处于玫瑰星云中的一个 YSO, 一个 Herbig Ae/Be 恒星 HD 97300 的原行星尘埃盘 (Protoplanetary Dust Disk) 和两个 post-AGB 星 HR 4049 和 HD 52961, 这两个 post-AGB 星具有碳氧混合的化学特性, 光谱中有 3.43 μm 和 3.53 μm 处纳米钻石 (Nanodiamonds) 的发射特征.

这些发现表明, C_{60} 存在于一个非常宽泛的恒星和星际环境中, 从恒星形成区, 年轻恒星, 直到演化晚期恒星, 前行星状星云和行星状星云, 以及星际介质.

4 星际 C₆₀ 分子的形成和激发

随着 C₆₀ 分子在各种天文环境中被探测到, 人们越来越关注 C₆₀ 分子, 对于基本的分子形成和激发却还存在着很多的争论.

4.1 C₆₀ 分子的形成

C₆₀ 分子在实验室是在富碳贫氢的条件下, 通过石墨的蒸发产生的. 对于星际空间 C₆₀ 分子的形成, 目前有三种主要模型.

(1) 含碳化合物的气相冷凝. 发现 C₆₀ 的经典实验表明: 在贫氢的环境里, 通过蒸发石墨之后的气相冷凝, 由碳原子, 小的碳团簇或者碳环的合成是可以有效地形成 C₆₀ 分子的. 在相同的环境下, 如果存在 H 元素, 就会阻碍 C₆₀ 分子的形成, 因为 C 会与 H 结合生成 PAH(Kroto 等人^[49], de Vries 等人^[50], Wang 等人^[51]). 不过, 这种模型受到了挑战, 其原因如下.

1) 在行星状星云 Tc1 中检测到 C₆₀ 和 C₇₀ 之后, Cami 等人^[39]指出, Tc1 的内核区域, 即富勒烯被探测到的区域, 是富碳贫氢的, 与实验室的条件一致, 支持气相凝结理论. 但是, 他们的贫氢假设受到了 Garcia-Hernandez 等人^[31]的挑战, 后者指出, Tc1 的星云和核都不是贫氢的, 其中探测到的富勒烯也就不可能是在贫氢的环境里产生的. Jaeger 等人^[52]通过实验表明, 在有氢的环境里, 只要凝聚温度足够高, 如达到 3500 K 以上, 富勒烯可以凝聚形成; 如果温度低于 1700 K 则形成 PAH 分子.

2) C₆₀ 分子在很多富氢的环境中检测到了, 包括反射星云, 银河系和麦哲伦云中的行星状星云, post-AGB 星以及前行星状星云, 这些源的 Spitzer/IRS 光谱都显示了 C₆₀ 分子与 PAH 共存. Bettens 等人^[53,54]提出, 富勒烯可能是在 ISM 中通过气相化学产生的, 可以解释 C₆₀ 和 PAH 在 ISM 中的共存.

3) 虽然 RCB 星是典型的富碳贫氢天体, C₆₀ 却还没有在典型的 RCB 星中探测到. 仅有的两个例外是 DY Cen 和 V854 Cen, 而这两个源相对来说不那么贫氢. RCB 的星周环境是与早期的 C₆₀ 分子产生的实验室条件非常类似的, 也是早期认为最有可能探测到宇宙 C₆₀ 分子的候选体.

(2) 氢化无定形碳(HAC)的解体. 在富氢环境下同时探测到 C₆₀ 分子和 PAH 分子, 促使 Garcia-Hernandez 等人^[41]提出: 富勒烯是固态 HAC 尘埃颗

粒解体的产物. 实验表明, HAC 的解体是有序的, 先释放小的 PAH 分子, 然后释放富勒烯和大的 PAH 分子团簇^[55]. HAC 的解体能够通过紫外(UV)光子的照射实现, 也可以由在前行星状星云和年轻的行星状星云中非常强烈的星风产生的激波来实现. 支持 HAC 分解模型的观测证据是, 在麦哲伦云的行星状星云中, HAC, PAH 分子团, 富勒烯, 脱氢碳分子团簇等脂肪族和芳香族分子共存.

(3) PAH 分子的激发或者光处理. Micelotta 等人^[56,57]提议, 通过 PAH 分子的激波处理可以形成富勒烯. 他们认为, 速度处在 75 km/s 到 100 km/s 的激波可以有效地改变 PAH 分子的结构, 而在恒星演化晚期阶段, 由于强烈的星风和脉动, 激波是普遍存在的; 对于 Herbig Ae/Be 恒星和 YSO, 外流/喷流的存在也使得激波常见. Chuvillan 等人^[58]通过实验证明, 在高能环境下, 小的类似 PAH 分子的石墨烯(Graphene)片状分子可以重新排列形成富勒烯. 通过高能电子(在天体环境中, 是高能光子、X 射线和宇宙线粒子)的诱导, PAH 分子经过脱氢, 碳原子流失, 进一步弯曲和闭合的过程, 最终就能形成富勒烯分子. Berne 等人^[59]提出, PAH 分子的光化学处理也是从石墨烯形成 C₆₀ 分子的一条路径. 来自大质量恒星的 UV 辐射能够将 PAH 分子完全脱氢而转化成石墨烯, 之后, 碳原子丢失, 五边形结构的形成使得分子开始卷曲, 他们假定, 分子内部五边形结构的迁移导致了开放边缘的合拢, 最终形成闭合的富勒烯结构. 支持该理论的观测证据是: 在反射星云 NGC 7023 中, C₆₀ 分子的丰度随着与中心星的距离减小而增加, 而 PAH 的丰度呈现相反的趋势, 这表明, C₆₀ 分子形成似乎与 PAH 分子的破坏是相关的.

4.2 C₆₀ 分子的激发

C₆₀ 分子的激发模型主要有两种, 一种是热平衡模型下的热激发, 另外一种是非热平衡模型下的紫外光子激发^[60].

(1) 热平衡模型. C₆₀ 谱线带的相对强度包含了分子发射条件的信息. Cami 等人^[39]根据热平衡假设从谱线强度比推算出了行星状星云 Tc1 中 C₆₀ 的激发温度(Excitation Temperature) T_{ex} . 在热平衡条件下, 激发温度 T_{ex} 是由玻尔兹曼公式定义的: $N_u \propto g_u \exp(-E_u/kT_{\text{ex}})$, 其中, N_u , g_u , E_u 是上能级的数密度, 简并度和能级能量, 根据观测到的波长为 7.03 μm , 8.50 μm ,

17.39 μm 和 18.90 μm 的 4 条振动谱线在 $\ln(N_u/g_u)$ vs (E_u/k) 图上的分布, 就可以推算 T_{ex} .

Cami 等人^[39]推出 Tc1 中 C_{60} 的 T_{ex} 约为 330 K, C_{70} 的 T_{ex} 约为 180 K, 由此得到结论“发射并不是起源于气相的分子, 而是附着在固体表面(含碳尘埃颗粒)的分子”, 理由是, 如果直接暴露在 Tc1 的 6–10 eV 的恒星光子之中的话, 像 C_{60} 和 C_{70} 这样的大分子将具有 800–1000 K 的激发温度. 他们推测, “这些分子应该与冷得多的物质有直接的接触, 而这种物质与恒星辐射场处在辐射平衡状态”.

Roberts 等人^[48]采取了同样的方法, 计算了 YSO 和 Herbig Ae/Be 恒星中 C_{60} 分子的激发温度, 他们也得出结论“描述谱线强度的模型最好是热模型而不是紫外光激发模型”.

Garcia-Hernandez 等人^[42]算出麦哲伦云的行星状星云中的 C_{60} 分子的 T_{ex} 约为 330–550 K, 他们认为: “麦哲伦云的行星状星云中的中性富勒烯似乎不是由来自中心星($T_{\text{eff}} > 31000$ K) 的紫外光子激发的, 实测 C_{60} 分子的谱线强度比要求的光子能量应该 < 5 eV. 富勒烯也许是在 HAC 的蒸发过程中或者就是附着在 HAC 表面时通过碰撞而激发的”.

(2) 单个紫外光子的随机加热模型. 不同于 Cami 等人^[39]所提议的 C_{60} 分子与固体的含碳物质处于热平衡而在固相发射的模型, Sellgren 等人^[32]提出了气相光致激发模型, 他们认为, NGC 7023 中的 C_{60} 分子处在气相, 被来自中心星的紫外光子随机激发, 之后, 通过辐射级联跃迁进行发射. 他们通过蒙特卡罗方法模拟了 C_{60} 分子吸收一个紫外光子之后的级联跃迁, 计算了这个过程中的分子内能和在每个红外带发射光子数目的演化.

不过, 这两种激发机制都有问题. 就像 Sellgren 等人^[32]指出的那样, Cami 他们的分析只是基于激发图推算出了一个单一的激发温度, 不能正确地描述被紫外光子激发的分子的级联跃迁. 相对而言, Sellgren 等人^[32]提出的气相光致激发模型比较接近大分子的辐射激发和衰变的实际情况^[61], 这种发射机制常常被用来解释 PAH 的红外辐射谱带的发射. 不过, 他们的计算只考虑了单能量光子的情况, 而不是真实的具有谱分布的光子, 另外, 单光子加热对于强的恒星辐射场是不合适的, 对于强的恒星辐射场, 应该采用多光子加热模型.

5 展望

从实验室首次合成 C_{60} 至今已有 20 多年. 20 多年时间的天文搜寻 C_{60} 积累了丰富的资料, 特别是 Spitzer 望远镜的成功发射和运行, 为研究银河系和河外星系 C_{60} 的物理化学性质提供了观测基础. 与此同时, 理论和地面实验也在同步进行, 一些先进的物理化学理论被应用到星际 C_{60} 的研究中, 为人们最终揭开星际 C_{60} 的这个谜团奠定了理论基础, 然而, 在天体物理条件下研究 C_{60} , 还有诸多问题有待天文学、物理学和化学工作者去逐步解决, 在星际 C_{60} 的研究中, 我们认为有以下基本问题需要进一步深入研究:

(1) 星际环境下 C_{60} 是如何形成的? 形成于贫氢环境气相凝聚? 还是由氢化无定形碳尘埃碎裂产生? 抑或源自 PAHs 的光解脱氢?

(2) 星际环境下 C_{60} 是如何被激发的? 在热平衡温度上的热辐射还是受单光子随机加热而导致温度涨落(Temperature Fluctuation)?

(3) 在星际环境 C_{60} 很容易被电离(其电离能为 7.61 eV), 为什么迄今为止观测到的都是中性 C_{60} ? 另外, 在星际空间, H 极为丰富, 可以想象, C_{60} 应该也很容易被氢化(Hydrogenated), 在其表面形成 C—H 键; 这些 C—H 键的振动模式应该在红外有显著的谱征, 但为什么天文观测尚未探测到氢化 C_{60} ?

(4) C_{60} 的紫外和可见光吸收系数是怎样的? 其红外谱征强度又是怎样的? 固态 C_{60} 与气态 C_{60} 的短波吸收以及红外发射的光学特性差别有多大? 这方面的文献很多, 但数据并不一致, 有些甚至达到几倍的差距. 这种数据是研究 C_{60} 的紫外激发与红外辐射必不可少的.

围绕上述问题, 湘潭大学纳米物理团队正积极着手从理论计算和实验测量两方面研究 C_{60} 的全波段光学特性, 特别是其紫外/可见光/近红外的电子跃迁谱以及红外振动谱. 同时, 通过与北京师范大学星际介质小组的紧密合作, 我们试图对星际 C_{60} 的起源/演化/激发建立一个清晰的图像. 在 C_{60} 的振动激发及红外辐射方面, 我们已经获得了令人鼓舞的初步结果.

我们采用 Li 等人^[62]创立的“纳米尘粒振动激发统计力学方法”来模拟 C_{60} 的振动激发过程, 计算 C_{60} 在给定辐射场光谱类型和给定辐射强度条件下的红外发射谱(及各振动谱带的强度). 通过与天文观测结果相比较, 可以推知 C_{60} 的丰度和所处环境的物理条

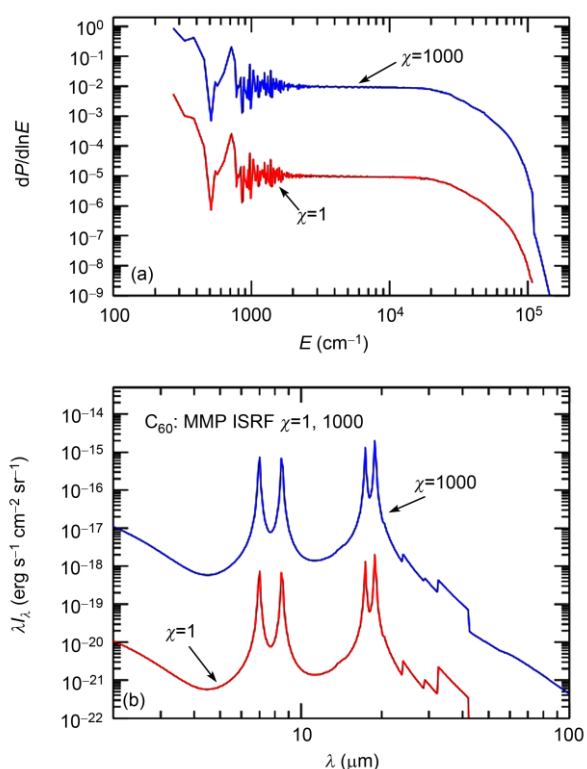


图 6 (网络版彩图) C_{60} 受 $\chi=1$ 倍和 $\chi=1000$ 倍星际辐射场^[64] 激发的能量分布函数(a)及其红外发射光谱(b)¹⁾

Figure 6 (Color online) Energy probability distribution functions (a) and infrared emission spectra (b) of C_{60} excited by the general interstellar radiation field [64] or by the same radiation field but with its intensity enhanced by a factor of 1000.

件(如星光强度等).

我们的基本思路是: 采用 C_{60} 分子的振动能量 E 来描述其(振动)态, 并把它能量分成 $(M+1)$ 个能级

($j=0, \dots, M$). 假定 P_j 为 C_{60} 占据在能量为 E_j 的第 j 能级的概率; T_{ij} 为在单位时间内 C_{60} 由 j 能级跃迁到 i 能级的概率. 通过求解稳态方程: $\sum_{j \neq i} T_{ij} P_j = \sum_{j \neq i} T_{ji} P_i$ (对 $i=0, \dots, M$) 可获得 $(M+1)$ 个 P_j , 然后计算出红外发射光谱. 这里的关键是确定 T_{ij} . 对于 $i < j$, T_{ji} 表征的是 C_{60} 从低能态 i 跳跃到高能态 j 的激发率, 可以很简单地从光子吸收率来算出; 对于 $i > j$, T_{ji} 表征的是 C_{60} 从高能态 i 通过辐射红外光子下降到低能态 j 的退激率, 可以通过 Einstein 细致平衡原理从激发率算出(为此我们需要各个能态的简并度, 这可以从态密度算出, 而态密度又可以通过统计 C_{60} 的所有振动模式而获得).

C_{60} 有 $(3 \times 60 - 6) = 174$ 个振动自由度, 有 174 个振动模式, 因而其振动态(Vibrational States)数目极其巨大, 当前的计算机很难精确考虑各个振动态. 因此, 我们采用 Draine 等人^[63]的方法, 将其振动能级分成 500 左右的“能级”($M \approx 500$). 每个这样的能级包含多个振动态. 关于“能级”的构造法, 详见文献[63]的附录 B. 该方法已被成功应用到 PAH 分子的振动激发与红外辐射研究, 详见文献[62]. 在上面的计算中, 我们只需要三个方面的信息: 1) C_{60} 从紫外/可见光到红外辐射的吸收截面, 只有知道了吸收截面才能算出光子吸收率和红外发射率; 2) C_{60} 的振动模式, 以此确定 C_{60} 的比热和态密度; 3) 星光光谱及其强度, 即振动激发源. 图 6 给出的是 C_{60} 分子受 1 倍或 1000 倍标准星际辐射场^[64]激发的能量分布概率函数及其红外辐射谱(关于 C_{60} 的振动激发机制及其在星际空间的红外辐射模型的初步结果参见文献 1)).

致谢 本项工作受到 NSF AST-1109039, NNX13AE63G, 及国家自然科学基金(批准号: 11173019)的资助, 同时感谢审稿人非常有启发的建议.

参考文献

- Hintenberger H, Franzen J, Schuy K D, et al. Periodicities in the abundance distribution of positively and negatively charged polyatomic, C_n^+ and C_n^- , in the high-frequency spark between graphite electrodes. *Naturforsch*, 1963, 18: 1236–1237
- Schultz H P. Topological organic chemistry, polyhedrons and prismanes. *J Org Chem*, 1965, 30: 1361–1364
- Osawa E. Superaromaticity. *Kagaku*, 1970, 25: 822–828
- Galpern E G, Bochvar D A. On hypothetical systems: Carbodecahedron, s-icosahedron and carbo-s-icosahedron. *Dokl Akad Nauk SSSR*, 1973, 209: 610–612
- Rohlfing E A, Cox D M, Klador A. Production and characterization of supersonic carbon cluster beams. *J Chem Phys*, 1984, 81: 3322–3330

1) Li A, Jiang B W, Zhong J X. On the vibrational excitation of C_{60} in the interstellar space. *Astrophys J*, 2013, in preparation

- 6 Kroto H W, Heath J R, O'Brien S C, et al. C_{60} : Buckminsterfullerene. *Nature*, 1985, 318: 162–163
- 7 Kratschmer W, Lamb L D, Fostiropoulos K, et al. Solid C_{60} : A new form of carbon. *Nature*, 1990, 347: 354–358
- 8 Pasquarello A, Michael S, Haddon R C. Ring currents in topologically complex molecules: Application to C_{60} , C_{70} , and their hexa-anions. *Phys Rev A*, 1993, 47: 1783–1789
- 9 朱道本, 王佛松. 有机固体. 上海: 上海科学技术出版社, 1999. 236–273
- 10 Haddon R C, Brus L E, Krishnan R. Electronic structure and bonding in icosahedral C_{60} . *Chem Phys Lett*, 1986, 125: 459–464
- 11 Yang S H, Pettiette C L, Conceicao J R E. UPS of buckminsterfullerene and other large clusters of carbon. *Chem Phys Lett*, 1987, 139: 233–238
- 12 Liu R, Klein M V. Raman study of vibrational properties in solid C_{60} . *Am Phys Soc*, 1992, 45: 11437–11440
- 13 Haufler R E, Wang L S, Chibante L P F, et al. Fullerene triplet state production and decay: R2PI probes of C_{60} and C_{70} in a supersonic beam. *Chem Phys Lett*, 1991, 179: 449–454
- 14 Smith III A B, Robert M S, Laurant B, et al. 1,2-Methanobuckminsterfullerene ($C_{61}H_2$), the parent fullerene cyclopropane: synthesis and structure. *J Am Chem Soc*, 1993, 115: 5829–5830
- 15 Skumanich A. Optical absorption spectra of C_{60} thin films from 0.4 to 6.2 eV. *Chem Phys Lett*, 1991, 182: 486–490
- 16 Yagi H, Nakajima K, Koswattage K R. Photoabsorption cross section of C_{60} thin films from the visible to vacuum ultraviolet. *Carbon*, 2009, 47: 1152–1157
- 17 《炭素材料》编委会. 中国冶金百科全书 炭素材料. 北京: 冶金工业出版社, 2004. 111–112
- 18 Li Y L, Ma H L, Yang B H, et al. C_{60} -PMMA composite membrane of infrared spectroscopy (in Chinese). *J Beijing Institute Technol*, 2005, 25: 543–545 [李英兰, 麻华丽, 杨保华, 等. C_{60} -PMMA 复合膜的红外光谱研究. 北京理工大学学报, 2005, 25: 543–545]
- 19 Gasyna Z, Andrews L, Schatz P N. Near-infrared absorption spectra of C_{60} radical cations and anions prepared simultaneously in solid Argon. *J Phys Chem*, 1992, 96: 1525–1527
- 20 Fulara J, Jakobi M, Maier J P. Electronic and infrared spectra of C_{60}^+ and C_{60}^- in neon and argon matrices. *Chem Phys Lett*, 1993, 211: 227–234
- 21 Moutou C, Sellgren K, Verstraete L. Upper limit on C_{60} and features in the ISO-SWS spectrum of the reflection nebula NGC 7023. *Astron Astrophys*, 1999, 347: 949–956
- 22 Wunderlich B, Jin Y. The thermal properties of four allotropes of carbon. *Thermochim Acta*, 1993, 226: 169–176
- 23 Jie J. The development and application of fullerene research (in Chinese). *J Shandong College Business Technol*, 2003, 3: 64–67 [解菊. 富勒烯的发展及应用研究. 山东商业职业技术学院学报, 2003, 3: 64–67]
- 24 Li M P, Zhao G, Li A. Interstellar dust: Current status and perspectives (in Chinese). *Prog Astronomy*, 2006, 24: 260–276 [李墨萍, 赵刚, 李爱根. 星际尘埃研究现状与进展. 天文学进展, 2006, 24: 260–276]
- 25 Snow T P, Seab C G, Joseph C L. A new search for interstellar C_3 . *Astrophys J*, 1988, 335: 185–187
- 26 Leger A, D'Hendecourt L, Verstraete L, et al. Remarkable candidates for the carrier of the diffuse interstellar bands: C_{60}^+ and other polyhedral carbon ions. *Astron Astrophys*, 1988, 203: 145–148
- 27 Foing B H, Ehrenfreund P. Detection of two interstellar absorption bands coincident with spectral features of C_{60}^+ . *Nature*, 1994, 369: 296–298
- 28 Maier J P. Interstellar detection of C_{60}^+ . *Nature*, 1994, 370: 423–424
- 29 Jenniskens P, Mulas G, Porceddu I, et al. Diffuse interstellar bands near 9600Å: Not due to C_{60}^+ yet. *Astron Astrophys*, 1997, 327: 337–341
- 30 Clayton G C, Kelly D M, Lacy J H, et al. A mid-infrared search for C_{60} in R Coronae Borealis stars and IRC+10216. *Astrophys J*, 1995, 109: 2096–2103
- 31 Garcia-Hernandez D A, Kameswara R N, Lambert D L. Are C_{60} molecules detectable in circumstellar shells of R Coronae Borealis stars? *Astrophys J*, 2011, 729: 126–131
- 32 Sellgren K, Werner M W, Ingalls J G, et al. C_{60} in reflection nebulae. *Astrophys J*, 2010, 722: 54–57
- 33 Nuccitelli D, Richter M J, McCall B J. Astrochemistry: Recent Successes and Current Challenges, Poster Book (IAU Symp. 235). Cambridge: Cambridge University Press, 2005. 236
- 34 Volk K, Kwok S, Hrivnak B J. High-resolution infrared space observatory spectroscopy of the unidentified 21 micron feature. *Astron Astrophys*, 1999, 516: 99–102
- 35 Buseck P R, Tsipursky S J, Hettich R. Fullerenes from the geological environment. *Science*, 1992, 257: 215–217
- 36 Zinner E. Stellar nucleosynthesis and the isotopic composition of premolar grains from primitive meteorites. *Annu Rev Earth Planet Sci*, 1998, 26: 147–188
- 37 Becker L, Bunch T E, Allamandola L J. Higher fullerenes in the Allende meteorite. *Nature*, 1999, 400: 227–228
- 38 Rietmeijer F J M. Iron-sulfides and layer silicates: A new approach to aqueous processing of organics in interplanetary dust particles, CI and CM meteorites. *Adv Space Res*, 2005, 36: 201–208
- 39 Cami J, Jeronimo B S, Peeters E, et al. Detection of C_{60} and C_{70} in a young planetary nebula. *Science*, 2010, 329: 1180–1182
- 40 Sellgren K, Uchida K I, Werner M W. The 15–20 μ m Spitzer spectra of interstellar emission features in NGC 7023. *Astrophys J*, 2007, 659: 1338–1351
- 41 Garcia-Hernandez D A, Manchado A, Garca-Lario P, et al. Formation of fullerenes in H-containing planetary nebulae. *Astrophys J*, 2010, 724: L39–L43
- 42 Garcia-Hernandez D A, Iglesias-Groth S, Acosta-Pulido J A, et al. The formation of fullerenes: Clues from new C_{60} , C_{70} , and (possible) planar C_{24} detections in magellanic cloud planetary nebulae. *Astrophys J*, 2011, 737: L30–L36

-
- 43 Zhang Y, Kwok S. Detection of C_{60} in the protoplanetary nebula IRAS 01005+7910. *Astrophys J*, 2011, 730: 126–130
- 44 Gielen C, Bouwman J, van Winckel H, et al. Silicate features in Galactic and extragalactic post-AGB discs. *Astron Astrophys*, 2011, 533: A99–A124
- 45 Gielen C, Cami J, Bouwman J, et al. Carbonaceous molecules in the oxygen-rich circumstellar environment of binary post-AGB stars: C_{60} fullerenes and polycyclic aromatic hydrocarbons. *Astron Astrophys*, 2011, 536: A54–A62
- 46 Evans A, van Loon J Th, Woodward C E, et al. Solid-phase C_{60} in the peculiar binary XX Oph? *Mon Not R Astron Soc*, 2012, 421: L92–L96
- 47 Rubin R H, Simpson J P, O’Dell C R, et al. Spitzer reveals what is behind Orion’s Bar. *Mon Not R Astron Soc*, 2011, 410: 1320–1348
- 48 Roberts K R G, Smith K T, Sarre P J. Detection of C_{60} in embedded young stellar objects, a Herbig Ae/Be star and an unusual post-asymptotic giant branch star. *Mon Not R Astron Soc*, 2012, 421: 3277–3285
- 49 Kroto H W, McKay K. The formation of quasi-icosahedral spiral shell carbon particles. *Nature*, 1988, 331: 328–331
- 50 de Vries M S, Reihs K, Wendt H R, et al. A search for C_{60} in carbonaceous chondrites. *Geochim Cosmochim Acta*, 1993, 57: 933–938
- 51 Wang X K, Lin X W, Mesleh M, et al. The effect of hydrogen on the formation of carbon nanotubes and fullerenes. *J Mat Res*, 1995, 10: 1977–1983
- 52 Jaeger C, Huysken F, Mutschke H, et al. Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and carbonaceous solids in gas-phase condensation experiments. *Astrophys J*, 2009, 696: 706–712
- 53 Bettens R P A, Herbst E. The Abundance of very large hydrocarbons and carbon clusters in the diffuse interstellar medium. *Astrophys J*, 1996, 468: 686–693
- 54 Bettens R P A, Herbst E. The formation of large hydrocarbons and carbon clusters in dense interstellar clouds. *Astrophys J*, 1997, 478: 585–593
- 55 Scott A, Duley W W, Pinho G P. Polycyclic aromatic hydrocarbons and fullerenes as decomposition products of hydrogenated amorphous carbon. *Astrophys J*, 1997, 489: L193–L195
- 56 Micelotta E R, Jones A P, Tielens A G G M. Polycyclic aromatic hydrocarbon processing in interstellar shocks. *Astron Astrophys*, 2010, 510: A36–A54
- 57 Micelotta E R, Jones A P, Tielens A G G M. Polycyclic aromatic hydrocarbon processing in a hot gas. *Astron Astrophys*, 2010, 510: A37–A52
- 58 Chuvilin A, Kaiser U, Bichoutskaia E, et al. Direct transformation of graphene to fullerene. *Nat Chemistry*, 2010, 2: 450–453
- 59 Berne O, Tielens A G G M. Formation of buckminsterfullerene (C_{60}) in interstellar space. *Proc Natl Acad Sci*, 2012, 109: 401–406
- 60 Liu J M, Jiang B W, Li A. Nanometer dust in the interstellar medium (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2012, 42: 877–888 [刘佳明, 姜碧涛, 李爱根. 星际介质中的纳米尘埃. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2012, 42: 877–888]
- 61 Li A. Interaction of nanoparticles with radiation. *Astrophys Dust*, 2004, 309: 417–452
- 62 Li A, Draine B T. Infrared emission from interstellar dust. II. The diffuse interstellar medium. *Astrophys J*, 2001, 554: 778–802
- 63 Draine B T, Li A. Infrared emission from interstellar dust. I. Stochastic Heating of Small Grains. *Astrophys J*, 2001, 551: 807–824
- 64 Mathis J S, Mezger P G, Panagia N. Interstellar radiation field and dust temperatures in the diffuse interstellar matter and in giant molecular clouds. *Astron Astrophys*, 1983, 128: 212–229

Interstellar C_{60}

LI Qiong¹, LI AiGen², JIANG BiWei³, XIANG FuYuan¹ & ZHONG JianXin^{1*}

¹ *Department of Physics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China;*

² *Department of Physics and Astronomy, University of Missouri, Columbia, MO 65211, America;*

³ *Department of Astronomy, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*

Fullerenes are cage-like molecules of pure carbon, such as C_{60} , C_{70} , C_{76} , and C_{84} . C_{60} , also known as buckminsterfullene, is the most stable fullerene and has a soccer-ball like structure. The presence of fullerenes in space has been suggested and observationally explored since their first synthesis in the laboratory in 1985 by Harry Kroto and his colleagues which earned them the 1996 Nobel prize in chemistry. C_{60} (as well as C_{70}) has recently been detected in reflection nebulae, post-asymptotic giant branch (AGB) stars, pre-planetary nebulae, planetary nebulae, Herbig Ae/Be stars, and young stellar objects through their characteristic infrared emission bands. The formation of C_{60} in interstellar and circumstellar environments is not firmly established. Experimental studies have shown that C_{60} can be made by gas-phase condensation (e.g. through vaporization of graphite) in a hydrogen-poor environment. In view of the simultaneous detection of C_{60} and polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH) molecules in hydrogen-rich interstellar and circumstellar regions, it has also been suggested that C_{60} could be generated by the decomposition of hydrogenated amorphous carbon, or the destruction of PAHs, both induced by shocks and/or ultraviolet photoprocessing. The phase (gas or solid) and excitation mechanism of C_{60} in interstellar and circumstellar conditions are also hotly debated in the literature. One model suggests that C_{60} is attached to dust and emits in solid-phase at the equilibrium temperature of the dust. Another model suggests that C_{60} is stochastically excited by ultraviolet photons and emits in the gas-phase. We prefer the latter model as in interstellar and circumstellar conditions the energy content of a C_{60} molecule is often smaller than the energy of a single starlight photon and C_{60} is expected to undergo stochastic heating.

C_{60} , interstellar medium, interstellar dust, infrared radiation

PACS: 98.38.-j, 98.58.-w

doi: 10.1360/132012-963