



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Unraveling the surface formation of regular and deuterated water in space : a combined laboratory and computational study

Lamberts, A.L.M.

Citation

Lamberts, A. L. M. (2015, May 20). *Unraveling the surface formation of regular and deuterated water in space : a combined laboratory and computational study*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/33044>

Version: Not Applicable (or Unknown)

License: [Leiden University Non-exclusive license](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/33044>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/33044> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Lamberts, Agneta Luciana Matthanja (Thanja)

Title: Unraveling the surface formation of regular and deuterated water in space : a combined laboratory and computational study

Issue Date: 2015-05-20

LIST OF PUBLICATIONS

SCIENTIFIC PUBLICATIONS

Low-temperature chemistry between water and hydroxyl radicals; H/D isotopic effects

T. Lamberts, G. Fedoseev, F. Puletti, S. Ioppolo, H. M. Cuppen, and H. Linnartz,
Mon. Not. R. Astron. Soc. (2015) submitted

Thermal H/D exchange in polar ice - deuterium scrambling in space

T. Lamberts, S. Ioppolo, H. M. Cuppen, G. Fedoseev, and H. Linnartz,
Mon. Not. R. Astron. Soc. 448 (2015) 3820

Experimental evidence for glycolaldehyde and ethylene glycol formation by surface hydrogenation of CO molecules under dense molecular cloud conditions

G. Fedoseev, H. M. Cuppen, S. Ioppolo, **T. Lamberts**, and H. Linnartz,
Mon. Not. R. Astron. Soc. 448 (2015) 1288

Low-temperature surface formation of NH₃ and HNCO: hydrogenation of nitrogen atoms in CO-rich interstellar ice analogues

G. Fedoseev, S. Ioppolo, D. Zhao, **T. Lamberts** and H. Linnartz,
Mon. Not. R. Astron. Soc. 446 (2014) 449

On the relevance of the H₂ + O reaction pathway for the surface formation of interstellar water

T. Lamberts, H. M. Cuppen, G. Fedoseev, S. Ioppolo, K.-J. Chuang, and H. Linnartz,
Astron. Astrophys. 570 (2014) A57

The formation of ice mantles on interstellar grains revisited - the effect of exothermicity

T. Lamberts, X. de Vries, and H.M. Cuppen,
Far. Disc. 168 (2014) 327

The Kinetic Monte Carlo Method as a Way To Solve the Master Equation for Interstellar Grain Chemistry

H. M. Cuppen, L. J. Karssemeijer, and **T. Lamberts**,
Chem. Rev., 113 (2013) 8840

SURFRESIDE²: An Ultrahigh Vacuum System for the Investigation of Surface Reaction Routes of Interstellar Interest

S. Ioppolo, G. Fedoseev, **T. Lamberts**, C. Romanzin, and H. Linnartz,
Rev. Sci. Instrum., 84 (2013) 073112

Water formation at low temperatures by surface O₂ hydrogenation III: Monte Carlo simulation

T. Lamberts H. M. Cuppen, S. Ioppolo, and H. Linnartz ,
Phys. Chem. Chem. Phys., 15 (2013) 8287

Efficient surface formation route of interstellar hydroxylamine through NO hydrogenation. II. The multilayer regime in interstellar relevant ices

G. Fedoseev S. Ioppolo, **T. Lamberts**, J. Zhen, H.M. Cuppen, and H. Linnartz,
J. Chem. Phys., 137 (2012) 054714

NO ice hydrogenation - a solid pathway to NH₂OH formation in space

E. Congiu, G. Fedoseev, S. Ioppolo, F. Dulieu, H. Chaabouni, S. Baouche, J. L. Lemaire, C. Laffron, P. Parent, **T. Lamberts**, H. M. Cuppen, and H. Linnartz,
Astrophys. J. Lett., 750 (2012) L12

CONFERENCE PROCEEDINGS

Solid State Pathways towards Molecular Complexity in Space

H. Linnartz, J. B. Bossa, J. Bouwman, H. M. Cuppen, S. H. Cuyllé, E. F. van Dishoeck, E. C. Fayolle, G. Fedoseev, G. W. Fuchs, S. Ioppolo, K. Isokoski, **T. Lamberts**, K. I. Öberg, C. Romanzin, E. Tenenbaum, J. Zhen,
The Molecular Universe, Proceedings of the IAU, IAU Symposium, Volume 280, p. 390-404 (2011)

CURRICULUM VITAE

On 12 September 1987 I was born in the Regent Quarter in Den Haag. Shortly thereafter, my parents decided to move to Zoetermeer, to a district with many other young families. My interest in math and science was nurtured there, both at home as well as by the technical lego of the neighbors and soon I would recite π to many decimal places. I started a classical education, including Greek and Latin, at secondary school. After our move to a small town, Renswoude, in the beautiful center of The Netherlands, I changed school and attended the Ichthus College in the nearby town Veenendaal. There, I faced the difficult choice between studying French language or chemistry.

I chose to study chemistry at the Radboud University Nijmegen, where I was welcomed by a warm atmosphere. I joined the Curriculum committee, which aims to improve and control of the educational quality of the chemistry Bachelor curriculum, and the Parents Day committee, which organizes a day for parents to experience life at the university by attending a special class and practical courses. The flexibility given to students in Nijmegen allowed me to replace chemistry courses by those from the mathematics and physics curriculum. Moreover, I was granted permission to perform three different research projects during my Master program; hydrodynamics of plankton (Denmark), photophysics of inorganic compounds (Ireland), and using phosphorescence in turbulence. During these final two thesis projects I already aimed at combining both experimental and modeled or theoretical results.

It was exactly the combination between experiments and theory, at the Sackler Laboratory in Leiden and at the Department of Theoretical Chemistry in Nijmegen, that made me choose the PhD position that resulted in the publication of this thesis. The membership of the Dutch Astrochemistry Network (DAN) and my close relationship to the Laboratory Astrochemical Surface Science In Europe (LASSIE) network have allowed me to gain access to a large variety of research topics. I have studied the formation of solid-state regular and singly deuterated water from a physical-chemical perspective against the background of astrochemistry. The experimental work has been performed in an Ultra-High Vacuum system, while the different surface processes are disentangled with a Kinetic Monte Carlo model. Simultaneously, the many Italian colleagues at the Observatory inspired and helped me pursue my interest in languages.

During my PhD I have presented my work at various colloquia and scientific meetings, not only in The Netherlands, but also in Denmark, Germany, the United Kingdom, and the United States. Furthermore, I have given public lectures at amateur astronomers clubs and for school children following an extra-curricular program. Finally I have been involved in the coordination of a PhD/postdoc networking day aiming to enhance the mutual contact between the junior scientists in the field of astrochemistry in The Netherlands.

In the near future I will start as a postdoc in the group of Herma Cuppen at the Radboud University for a few months after which I will move to Stuttgart in Germany and join the group of Johannes Kästner. There, I will be able to transfer my knowledge about astrochemistry, while learning more about quantum chemistry within the framework of the importance of tunneling in chemistry.

DANKWOORD

Writing a thesis may seem to be a lonely task at times, but I feel lucky with the people that have surrounded me, in the various places in The Netherlands and elsewhere around the globe, that have all contributed in their own respective ways. It is thanks to them that this manuscript has been completed and it is thanks to them that I have learned so many things, not only concerning science, but also about life, culture, music, food, and about myself.

First of all, I owe a big thank you to my three supervisors. Harold, dank voor de vrijheid die mij hebt gegund in het vinden van mijn weg. Herma, ik heb me altijd thuis gevoeld in jouw groep, ondanks de kortere tijd die ik daar heb doorgebracht. Dankjewel voor de koffiegesprekken over van-alles-en-dan-nog-wat en voor je chemische blik op ons werk. Sergio, grazie for your instructions first in the laboratory and later from all the various parts of the world that you have traveled.

Leiden Observatory is a very specific place to be employed; not only does it bring together observers, modelers, and experimentalists, it also combines many different nationalities and work styles, and therefore many points-of-view. Allereerst een heel hartelijk dankjewel aan de secretaresses en de computer groep, in het bijzonder Anita, David, Erik, Jeanne en Liesbeth. My office mates, Isa, Umut ('evet'), Joe, Ricardo (we love the 90's!), Merel, and Christian have made the office a better place. My fellow Sackler laboratory members, Anton, Dongfeng, Edith, Euan, Gustavo, Hector, JB, Jo G., Kirsten, Ko-Ju, Pablo, Steven, and Vincent, thanks for the many papercakes that you have caused! Junfeng, I have really appreciated your company. Niels, let's go to a party again! Gleb, without you in the lab and in the Kaiser Lounge, my PhD life would not have been the same, a big big thank you. Iemand die collectief gemist wordt als hij op vakantie is, is Martijn; dankjewel voor jouw bijgedragen steentje. En ook onze nieuwste aanwinst, Aart, dankjewel voor al die flauwe grappen! The Astrochem corridor has been a wonderful place to pick up the necessary astronomical knowledge, thank you for your willingness to teach me, in particular Catherine, Ewine, Daniel H., Kenji, Lars, Maria, Mihkel, and Xander (bedankt voor de koekjes!). Magnus, you also belong in that category, but you and Mihaela are also wonderful BBQ-in-the-rain companions. Caroline, ik had niet gedacht dat het geven van een vak waar ik niets vanaf wist, ook nog een vriendin zou opleveren! Thanks also to Carl, Clément, Cristóbal, Carina, Emanuele, Francisco, Gaby, Heather, Marissa, Mattia, Mher, Monica, Olmo, Tiffany, and Vachail. E poi, gli 'Italiani'! Grazie mille for allowing me to be part of such a wonderful group of friends, for the dinners, birra crucis, flower field cycling trips, Koninginnenach, and all our other activities together. Most of all, thank you for being around during the highs and lows, and for the conversations about the more important things in life. But also... Marco, thank you for your passion of food. Berenice (and Jesús), thank you for introducing the cake game, whichever day the cake finally arrived, it was always a pleasure. I hope to continue to enjoy the parties at Alessandra and Fabio, pulcino pio in particular is engraved in my memory for ever. I am happy to have copied large parts of your music collection, Nicola, otherwise I would have really missed out. Thank you for the two bottles you left us, the production is ongoing! Silvia, thank you for accompanying me to the gym, for the dinners at your house, the girls night out, and the shopping trips we undertook. Singing and playing music live in a bar, or downstairs in the kantine, has been an incredible pleasure with you, Matteo, but never again Broadway! Irene, chica, I will never forget our

Sicilian experience (cannoli!!!) nor your crazy energy when you drink a coffee, you are really an amazing person!

Ed anche Gaetano, grazie mille per il tuo aiuto con questa bellissima copertina!

Maar ik heb ook consequent, vier jaar lang, ongeveer een dag in de week in Nijmegen gewerkt, in het Bourgondische Havanna aan de Waal. Met enige regelmaat heb ik daar het gezelschap mogen genieten van twee speciale jongemannen. Onze eerste gezamenlijke avondmaaltijd vond plaats halverwege mijn promotie, toen ik, zacht uitgedrukt, niet de meest enthousiaste promovenda was. Leendertjan, het was goed om met een fysicus te kunnen praten over gecondenseerd water in de ruimte, en in de bergen, net zoals het goed was om samen te koken en een wadloopexcursie op touw te zetten. Joost, jouw passie voor een goede sfeer, het theater, lekkere wijn, mooie kaasjes, je eindeloos-lijkende geheugen en bijzonder goed getimed mailtjes waren een keer op keer een cadeautje. Jolijn, dankjewel voor de gezelligheid tijdens het delen van de kamer op menig conferentie. Adrien, merci de m'avoir aidé à rétablir mon français un peu rouillé! Furthermore, thanks to the office mates, master students and fellow PhD students for their company during the frequent cake meetings: Boy, Daniel, Eduardo, Koos, Lei, Liesbeth, Peter, Sasha, Simone, Tijs en Xander. Ook Gerrit en Ad voor hun aanwezigheid tijdens de dagelijkse groeps lunch die het gespreksniveau wisten op te krikken tot schijnbaar onbereikbare hoogten, maar ook voor hun waardevolle wetenschappelijke adviezen.

Being part of the Dutch Astrochemistry Network (DAN) and being related to the Laboratory Astrochemical Surface Science In Europe (LASSIE) meant being lucky enough to meet many interesting people, whichever way you wish to interpret the word 'interesting'. In particular discussions, language exchange and drinks with Ewelina, Fabrizio, Geert, Leon, and Tobias are gratefully acknowledged!

En dan zijn er nog al die mensen die veel minder te maken hebben gehad met mijn dagelijkse bezigheden.

Ook al klaag ik er wel eens over het kneuterige Veenendaal, maar het is heel tof dat we elkaar ieder jaar één keer met z'n allen weten te treffen aldaar om een heerlijk avondmaal te verorberen. Wat zijn we veel veranderd ten opzichte van de vouwwagen kampeertochten die we vroeger maakten, op naar de volgende 10 jaar. Lieve Andrea, Arwin, Cornelie, Jan-Willem, Eline, Michiel, Julia, Arjan, Leendert en Sanne: bedankt!

Het is uiteindelijk dankzij de studie scheikunde, dat ik in Leiden beland ben. Jasper, dankjewel voor je steun, ik weet dat je je best hebt gedaan om elke vrijdag om te toveren in iets positiefs. Jurn, dank voor het logeeraadres boven aan de 'berg'. Jan en Cynthia, veel geluk bij de aankomende miljoenenjacht, met de iBood box en tot snel! Bram, dank voor het delen van de promotieperikelen en gezelligheid samen met Michelle. Yvette, het is altijd fijn om even te kunnen bijpraten, ik vind het bijzonder hoe we elkaar toch niet uit het oog verloren zijn. Bijpraten, al dan niet op gchat of aan de telefoon, doe ik ook bijzonder graag met Carlijn. Jij hebt alle ups en downs meegemaakt en hebt mij meer dan eens kritisch en realistisch naar mezelf doen kijken. Ontzettend bedankt, ik kijk uit naar de volgende citytriptreinreis samen!

Nico, pinguinpakje of niet, zonder jou was ik hier wellicht nooit aan begonnen. Dank voor je wetenschappelijke opvoeding en die daarbuiten; ik zie de paddestoelen tegenwoordig zelfs staan als ik op een conferentie langs de berm loop.

Het heeft even geduurd voordat ik in Leiden mijn plekje had gevonden, maar twee belangrijke factoren die me daarbij geholpen hebben zijn het huis waarin het heb gewoond en het oude fabriekspand waarin ik heb gekookt.

Elles, je bent een beetje gek, ik ook, en dat vind ik leuk, net zoals het dragen van twee verschillende sokken, dat is ook leuk. En Thalassa, hoe had ik ooit #YOLO 2013 kunnen doorkomen zonder jou. Wat hebben we bizar veel mensen ontmoet, chocola gegeten, rare films gezien,

plan A en B geweest, en ... gewoon veel meegemaakt. Ik ben benieuwd hoeveel appjes we blijven sturen per dag!

Koken en eten zijn twee terugkerende belangrijke zaken in mijn leven, en die worden uitstekend gecombineerd met interessante mensen en grote idealen bij de Vrijplaats. Tony, Petra, Coen, Maria, Katie en al die anderen, dankjewel voor de bijzondere sfeer die er heerst. Rest mij alleen nog te zeggen dat er niets beters bestaat om je hoofd leeg te maken, dan het snijden van 5 kilo ui.

En natuurlijk niet te vergeten de wat meer recente aanwinst: teh_CRW! Daniel, niet alleen als kritische collega en gids in New York heb ik je gewaardeerd, maar je gezelligheid en uitstapjes naar verschillende muziekaangelegenheden worden ook buiten het lab op prijs gesteld. Dan mijn mede-vega-eerste-keer-wintersporter Jelle, wanneer verhuis je nou naar Leiden? Gezond eten is wel een dingetje in de groep, maar lekker eten nog veel meer: Gerdien wat een geluk dat ik met jou mijn passie voor koken kan delen en wat fijn dat Ashgard daar ook nog eens helemaal in meegaat.

Onderdeel zijn van een familie is iets dat lang ongrijpbaar is geweest, maar gelukkig baart oefening kunst! Tineke, jou valt de eer toe mijn eerste 'leermeester' te zijn geweest in dat opzicht, dank daarvoor. Lieve Stremmelaar-Nolten-Busch ooms, tantes, neven, nichten, aange trouwde sterrenkundig geïnteresseerden of juist helemaal niet; dankjewel voor de bezoeken aan Duitsland en Frankrijk, voor de gezelligheid bij het Kerstival, voor de slechte grappen en voor jullie lieve (?) (klein-)kinderen! De afgelopen twee-en-een-half jaar koester ik. En Renate, jij in het bijzonder bedankt, zonder jou had ik veel niet gedurfd. Wat betreft familiebijeenkomsten: lieve heren Boltje en dames Vogt en Al-mafraji, dank voor de gezelligheid!

Aan de allerliefste, Daan, ik had nooit durven hopen op zo'n bijzonder afgelopen jaar. Jij hebt mij telkens weer opgevangen en door de moeilijke eindfase heengesleept. Onze levens zijn in elkaar overgevoerd zoals zacht water door je handen kan stromen terwijl je de tijd verliest ;-). Ik heb heel veel zin in een toekomst met jou, in onze eindeloos-energieke-maar-voor-andere-vermoeiende interactie en de avonturen die ons te wachten staan. Ik vind je tof!

Voordat dit proefschrift op zijn einde loopt, wil ik nog terug naar het allereerste begin. Hoe anders had het kunnen lopen zonder het speelgoed dat zo zorgvuldig werd uitgekozen door mijn vader, zonder de dagelijkse toewijding van mijn moeder en bovenal zonder hun bijzondere, soms uitvoerige, uiteenzettingen over wat echt belangrijk is in dit leven. Het voelt alsof een eenvoudig woord of kleine daad niet genoeg is, maar lieve Herman en Marijke: dankjewel.

On ne voit bien qu'avec le cœur. L'essentiel est invisible pour les yeux.

Antoine de Saint-Exupéry

