

**Physics and chemistry of interstellar ice** Guss, K.M.R.

#### Citation

Guss, K. M. R. (2013, March 26). *Physics and chemistry of interstellar ice*. Retrieved from https://hdl.handle.net/1887/20666

Version:	Corrected Publisher's Version
License:	<u>Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the</u> <u>Institutional Repository of the University of Leiden</u>
Downloaded from:	https://hdl.handle.net/1887/20666

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

Cover Page



# Universiteit Leiden



The handle <u>http://hdl.handle.net/1887/20666</u> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Guss (née Isokoski), Karoliina Marja-Riita Title: Physics and chemistry of interstellar ice Issue Date: 2013-03-26

### **Nederlandse samenvatting:**

## Fysica en chemie van het interstellaire ijs

#### Introductie

Interstellair ijs speelt een belangrijke rol in een aantal astrochemische processen. Gasfase reacties die afhankelijk zijn van botsingen tussen drie deeltjes zijn zeer zeldzaam in het ijle interstellaire medium. Maar aan het oppervlak van koude stofdeeltjes kunnen moleculen blijven plakken - er ontstaan laagjes ijs - en op en in dit molecuul reservoir kunnen vooral vrije atomen en radicalen reacties aangaan. De samenstelling en structuur van het ijs heeft een belangrijke invloed op deze processen. Daarnaast weerspiegelen de eigenschappen van interstellair ijs de geschiedenis hoe het is gevormd en is geëvolueerd is. Het proefschrift dat hier voor u ligt bespreekt de natuurkundige en chemische processen in interstellaire ijs, die zijn onderzocht met behulp van zowel astronomische waarnemingen als experimentele laboratorium technieken.

Het interstellaire medium (ISM) – per definitie al het materiaal dat zich bevindt tussen de sterren in een sterrenstelsel – is inhomogeen verdeeld over gas (99%) en stof (1%). In sommige gebieden van het ISM - grote moleculaire gaswolken - is de aanwezige massa zo hoog dat materiaal onder zijn eigen zwaartekracht ineen kan storten, hetgeen uiteindelijk leidt tot de geboorte van een nieuwe ster. De buitenkant van dit soort wolken, absorbeert het energierijk interstellair Ultraviolet (UV) licht dat het interstellaire stralingsveld domineert. Daardoor neemt binnenin de wolken de temperatuur sterk af. Onder 25 K vriezen vrijwel alle moleculen vast op stofdeeltjes en hierbij ontstaat interstellair ijs op een tijdschaal van ~400,000 jaar. De moleculaire samenstelling van dit nieuw gevormde interstellaire ijs wordt gedomineerd door water (H<sub>2</sub>O), maar bevat ook significante hoeveelheden H<sub>2</sub>CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, CO en CH<sub>3</sub>OH (figuur 1). Afgeschermd van het UV licht, kunnen deze atomen en moleculen reacties met elkaar aan gaan.

In tegenstelling tot interstellair UV licht, kan kosmische straling diep doordringen in moleculaire wolken. Naast directe interactie met het ijs kan deze straling ook  $H_2$  exciteren. Als gevolg hiervan zal  $H_2$  straling uitzenden, rond 121 nm. Dit UV licht heeft een lagere stralingsdichtheid dan de energierijke UV straling buiten de wolk, maar is nog steeds sterk genoeg om fotochemische reacties in het interstellair ijs te veroorzaken. Zowel UV als kosmische straling kan bindingen in ijs moleculen breken, waardoor zeer reactieve radicalen ontstaan. De radicalen kunnen recombineren tot de oorspronkelijke moleculen of, wanneer ze voldoende energie hebben, zich verplaatsen door het ijs en reageren met andere deeltjes, waardoor nieuwe moleculen ontstaan. Radicalen kunnen ook vast



Figuur 1 – Infrarood spectrum van de W33A protoster (uit Gibb et al. (2000)).

komen te zitten in het ijs, en zijn dan verankerd totdat er een verandering ontstaat in de ijscondities. De geboorte van een nieuwe ster en de continue inval van materiaal zorgt ervoor dat de temperatuur van het interstellair ijs in de buurt van de ster toeneemt. Eén van de consequenties hiervan is dat atomen, moleculen en radicalen, mobiel worden en met elkaar kunnen reageren, waardoor grotere moleculen ontstaan. De reactie efficiëntie van dit process wordt mede beïnvloed door structurele veranderingen in het interstellaire ijs. De hoeveelheid oppervlak die een ijs heeft, bijvoorbeeld, dient voor sommige reacties als katalysator, en de mate van porositeit van een ijs bepaalt dus de efficiëntie van deze reacties. Niet alleen de structuur van het ijs is van belang, ook de samenstelling. Die laatste verandert weer met de temperatuur. Op hogere temperaturen zullen vluchtige componenten verdampen, waardoor er een segregatie ontstaat van gemengde ijs componenten. Uiteindelijk zal al het ijs dichtbij de ster verdampen

Verschillende complexe moleculen, zoals  $C_2H_2OH$ , HCOOCH<sub>3</sub> en CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub> zijn met telescopen gedetecteerd in de gasfase. De waargenomen dichtheden kunnen niet worden verklaard met gasfase reacties van eenvoudige moleculen. Men denkt dat een groot gedeelte van de gevonden complexe moleculen ontstaan moet zijn in het ijs op stofdeeltjes en dat deze pas later, toen de temperatuur verder opliep, verdampten. Alles wijst erop, dat in interstellair ijs een complex netwerk van vaste stof reacties plaats vindt, maar veel van deze processen zijn nog niet goed begrepen.

Dit proefschrift draagt bij aan het begrip van de fysische en chemische eigenschappen van interstellair ijs. Eén van de doelen is om te begrijpen wat de structuur en samenstelling van ijs in de ruimte is, en hoe deze worden beïnvloed door het verwarmingsproces vlak voor de geboorte van een ster (hoofdstuk 2 en 3). We proberen de samenstelling van interstellaire ijs te begrijpen door spectra uit het laboratorium te vergelijken met spectra verkregen met telescopen (hoofdstuk 4 en 5). Dit proefschrift beschrijft verder een nieuwe experimentele opstelling waarmee de vorming van complexe moleculen in ijs onder interstellaire condities wordt nagebootst (hoofdstuk 6) en laat zien hoe dergelijke stoffen gebruikt kunnen worden als observationele indicatoren voor grote schaal processen in het ISM.



Figuur 2 – Compact (links) en poreus (rechts) amorf water ijs.

#### Morfologie van het interstellaire ijs

De structuur van ijs beïnvloedt de chemie in het interstellaire medium. Figuur 2 illustreert het verschil tussen compact en poreus water ijs. Poreus H<sub>2</sub>O-ijs heeft een zeer groot oppervlak (in de grootte orde van ~100 m<sup>2</sup>/g), en dit werkt als katalysator voor interstellaire oppervlakte reacties. Wanneer de porositeit (en dus de hoeveelheid oppervlak) afneemt, zal de efficiëntie van deze oppervlakte reacties afnemen.Gelijktijdig kan een dergelijke verandering ook de chemische reactiviteit van vastzittende moleculen en radicalen versnellen.

Het doel van hoofdstuk 2 en 3 is om de structurele veranderingen, als gevolg van een opwarm proces (zoals rond een jonge ster) voor poreus  $H_2O$  en  $CO_2$  ijs te karakteriseren. In het interstellaire medium wordt ijs mogelijk zeer poreus gevormd. Verwarming door de ster zorgt er voor dat de poreusheid geleidelijk aan af neemt. In het laboratorium, wordt dit waargenomen als het dunner worden van het ijs en het verzwakken van spectrale vingerafdrukken die typisch zijn voor een poreus ijs. In het geval van H<sub>2</sub>O ijs, neemt de dikte met 12% af tussen 22 en 120 K en zorgt een fase overgang voor een versnelling van dit proces bij 38 K. Het is opmerkelijk dat niet alle porositeit verloren gaat in het opwarm proces. Het ijs heeft een geheugen van zijn oorspronkelijke structuur, tot op het moment dat ijs moleculen verdampen. De aanwezigheid van porositeit bij hogere temperaturen draagt bij aan de katalytische eigenschappen van het ijs. Daarnaast kunnen vluchtige moleculen vast komen te zitten in poriën, en verdampen pas wanneer ook de ijs matrix zelf verdampt. Men is er tot nu toe vanuit gegaan, dat interstellair  $H_2O$  ijs compact en amorf is, zogenaamd c-ASW, voornamelijk op grond van de missende spectrale vingerafdrukken die typisch zijn voor H<sub>2</sub>O moleculen die deels vrij kunnen trillen aan oppervlaktes. In dit proefschrift wordt aangetoond, dat thermische processen deze vingerafdrukken doen verdwijnen, terwijl een gedeelte van de porositeit gewoon blijft voortbestaan. Het is waarschijnlijk dat in de ruimte meer poreus amorf ijs (zogenaamd p-ASW) voorhanden is, dan tot nu toe werd aangenomen.

#### Spectroscopie van interstellair ijs

Hoofdstuk 4 en 5 richten zich op de interpretatie van de spectroscopische kenmerken van interstellair ijs. Na  $H_2O$  is vooral CO prominent aanwezig als component van interstellaire ijs. CO ijs is waargenomen in pure vorm, gemengd met  $CO_2$  en in een waterstof-binding-rijke omgeving. In de afgelopen jaren werd vooral water genoemd als mengcomponent om zo'n omgeving te verklaren. Echter laboratorium metingen aan CO en  $H_2O$  ijs waren niet in staat om de astronomische waarnemingen te reproduceren. In hoofdstuk 4 is daarom de spectroscopische vingerafdruk van CO onderzocht voor wisselwerkingen met verschillende, waterstof bevattende moleculen, en de resulterende spectra zijn met waarnemingen vergeleken. Het werk in hoofdstuk 4 laat zien, dat het mogelijk is de astronomische waarnemingen te verklaren met een ijs mengsel van CO en  $CH_3OH$  (methanol), maar zonder water. Inderdaad tonen laboratorium experimenten aan, dat methanol uit CO gevormd kan worden door toevoeging van waterstof atomen en de gevonden spectra zijn volledig consistent met de chemische modellen.

In hoofdstuk 5 worden de spectrale eigenschappen van puur  $CO_2$  ijs besproken. De spectrale eigenschappen van  $CO_2$  ijs zijn uitermate gevoelig voor de omgeving waarin het  $CO_2$  zich bevindt, en kunnen net als bij CO ijs, gebruikt worden om de samenstelling van interstellaire ijs af te leiden. Een aantal banden van  $CO_2$  ijs zijn zeer smal, en mede daarom tot op heden niet goed gekarakteriseerd in laboratorium metingen. Daardoor is de interpretatie van interstellair  $CO_2$  ijs, met name richting bronnen met een grote hoeveelheid puur  $CO_2$  ijs niet volledig betrouwbaar. In dit hoofdstuk worden de ontbrekende hoge resolutie data in het infrarood voor puur  $CO_2$  ijs gepresenteerd voor temperaturen tussen 15 en 75 K.

#### Complexe moleculen in het laboratorium

Het waarnemen van complexe moleculen in de ruimte verklaart niet hoe deze zijn ontstaan. Hiervoor zijn laboratorium metingen vereist. In hoofdstuk 6 wordt een nieuwe opstelling beschreven, MATRI2CES, waarmee het mogelijk is om reacties in interstellair ijs te simuleren onder volledig gecontroleerde laboratorium omstandigheden. Een zeer hoge gevoeligheid is nodig, om ook zeer geringe hoeveelheden nieuw gevormde moleculen waar te kunnen nemen. MATRI2CES - Mass Analytical Tool for Reactions in Interststellar ICES) combineert 'time-of-flight' massa spectrometrie met laser verdamping van ijs waarin met behulp van ultraviolet licht reacties zijn gestart. De nieuwe opstelling biedt inzicht in de wijze waarop in de ruimte complexe moleculen - ook moleculen die van belang zijn als bouwstenen van het leven - ontstaan.

#### Complexe moleculen in stervormings gebieden

In hoofdstuk 7 worden complexe moleculen gebruikt als indicatoren voor de vorming van massieve sterren, een proces dat nog steeds niet goed begrepen wordt. De vorming van lichte sterren, met een massa vergelijkbaar met die van onze zon, leidt ertoe dat het invallende materiaal zich meer en meer in een vlak bevindt. Hierdoor kunnen UV fotonen van het centrale object (de protoster) ontsnappen en zo het ijs aan de buitenkant van het omhulsel bestralen. Onze hypothese is dat deze extra UV straling leidt tot een hogere hoeveelheid complexe moleculen vergeleken tussen twee bron-types, een met een vlakkere schijf structuur en een zonder een schijf structuur. De conclusie is dat er geen substantieel verschil bestaat in de hoeveelheid complexe moleculen in beide bron-types. Een mogelijke verklaring is dat alle massieve sterren gevormd worden in een vergelijkbare geometrie. Een andere mogelijkheid is dat het extra UV licht van de ster geen rol van betekenis

speelt in de productie van complexe moleculen en dat hun ontstaan vooral wordt bepaald door de koude fase van de moleculaire wolk.