



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Complex processes in simple ices : laboratory and observational studies of gas-grain interactions during star formation

Öberg, K.I.

Citation

Öberg, K. I. (2009, September 16). *Complex processes in simple ices : laboratory and observational studies of gas-grain interactions during star formation*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/13995>

Version: Not Applicable (or Unknown)
License: [Leiden University Non-exclusive license](#)
Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/13995>

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

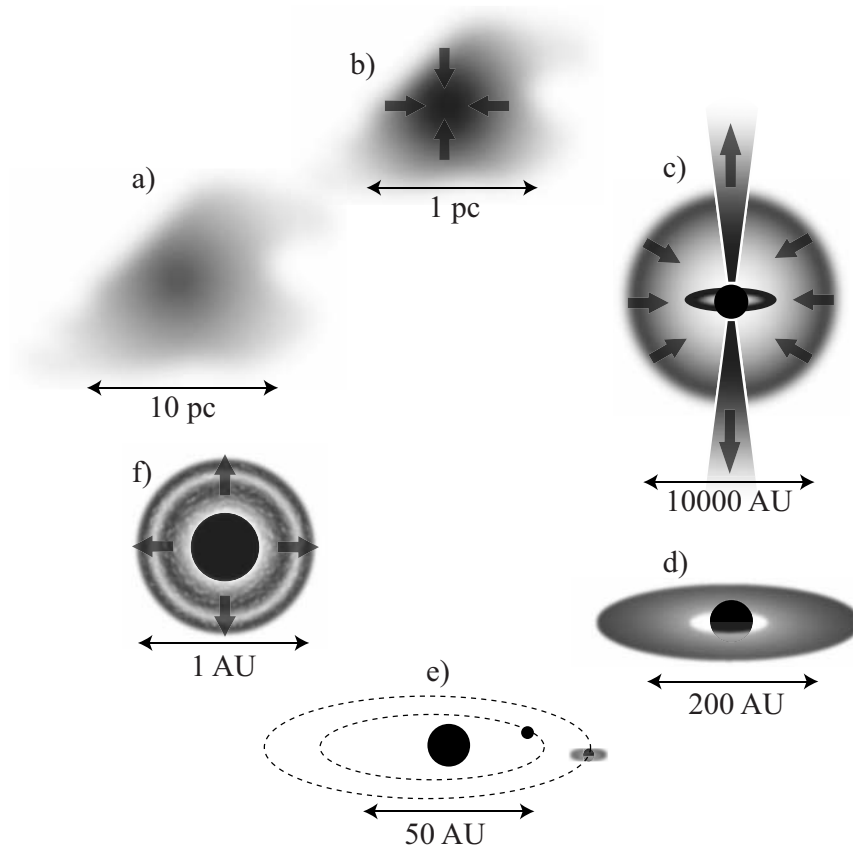
NEDERLANDSE SAMENVATTING

De eerste chemie

Veertien miljard jaar geleden ontstaat uit de Big Bang een heet en stralingsgedomineerd universum waarin zelfs atomen niet kunnen overleven. Het heelal expandeert, wordt kouder en de eerste atomen ontstaan. Het heelal wordt ook donker. De 'Dark Ages' beginnen en de eerste chemische reactie vindt plaats. Een ion en een atoom gaan een binding aan en het eerste molecuul in het heelal is een feit. Andere moleculen volgen, en dat terwijl koolstof, zuurstof en alle andere zwaardere elementen nog moeten worden gevormd in sterren. Sterren die miljoenen jaren later ontstaan en het heelal verlichten. De 'Dark Ages' komen tot een eind. In de sterren wordt waterstof omgezet in koolstof en zuurstof en zwaardere atomen. Deze elementen worden later door de sterren de ruimte ingeslingerd tijdens hun explosieve einde. In de miljarden jaren die volgen wordt op deze manier de ruimte tussen de sterren gevuld met materie - het ijle interstellair medium - dat meer en meer zware elementen evenals kleine stofdeeltjes gaat bevatten. De organische chemie die we op Aarde kennen, op andere hemellichamen in ons zonnestelsel, rond jonge sterren en in afgelegen melkwegstelsels vindt haar oorsprong in deze kosmische explosies in een periode dat het heelal net een miljard jaar oud was.

Kosmische kraamkamers

Het bestuderen van sterren is bijna net zo oud als de mensheid zelf. Het onderzoek aan het interstellair medium is net 100 jaar oud. Daar waar deze materie geconcentreerd voorkomt wordt bij zichtbare golflengtes de blik op de achterliggende sterren verhinderd, zoals de zon schuil gaat achter wolken in onze dampkring. De donkere interstellair wolken bestaan uit gas en stof en vormen de materie waaruit nieuwe sterren ontstaan. Ze zijn koud (-263 °C) en roteren langzaam. Sommige kosmische wolken bevatten genoeg materie om onder hun eigen zwaartekracht te bezwijken (Figuur 1). De wolk stort ineen, wordt warmer en gaat sneller roteren om energie en impuls te behouden. Temperatuur en dichtheid lopen dusdanig op dat een protoster ontstaat. De jonge ster omringt zich met stof en gas uit de oorspronkelijke wolk. Deze materie wordt verder door de ster opgezogen of door straling van de ster weggeblazen. Daarbij ontstaat rond de ster een schijf bestaand uit materiaal waaruit later planeten vormen: stofdeeltjes botsen, plakken aan elkaar en gruis, kiezel, rotsen en uiteindelijk kometen en planeten kunnen ontstaan. De chemische evolutie van deze proto-planetaire schijf is bepalend voor het ontstaan van (pre)biotische moleculen op planeten, en daarmee van het leven zelf. Een goed begrip van dit proces vereist kennis van de processen die de chemie in een proto-planetaire schijf sturen.



Figuur 1 – De geboorte van een ster start in een interstellair wolk (a) die onder zijn eigen gewicht ineen stort (b) en een protoster vormt (c). Hieruit ontstaat een reguliere hoofdreeks ster die wordt omhuld door een schijf van gas en stof (d). Dit materiaal vormt de basis voor de planeten (e). Wanneer de ster sterft, wordt nieuw materiaal in de ruimte gestuwd (f) en de cyclus kan opnieuw beginnen.

Ijs en gas rond jonge sterren

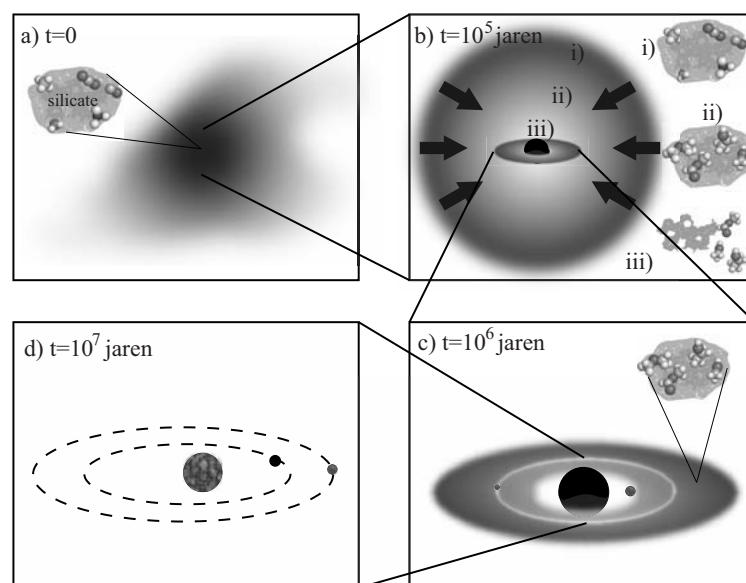
Interstellair wolken en proto-planetaire schijven bestaan uit een mengsel van gas en microscopisch kleine stofdeeltjes. De chemische samenstelling van deze materie verandert gedurende het stervormingsproces. In de eerste fase, voordat de wolk gravitationeel instabiel wordt, bevinden zich de meeste atomen (waterstof, stikstof, zuurstof en koolstof) en moleculen (zoals moleculair waterstof en koolstofmonoxide, CO) in de gasfase. De dichtheden in de wolk zijn te gering om via drie-deeltjes botsingen chemische reacties te realiseren. Bij zo'n botsing vormen twee deeltjes een nieuw molecuul en het derde deeltje voert gelijktijdig overvloedige energie af, zodat het reactieproduct chemisch stabiliseert. Zelfs botsingen van twee deeltjes in de ruimte zijn zelden, tenzij één van de deeltjes

geladen is en de botsingspartner over een grotere afstand kan aantrekken. Vergeleken met de Aarde, waar reacties vooral via drie-deeltjes botsingen plaatsvinden, worden chemische gasfase processen in de ruimte vrijwel volledig gedomineerd door wisselwerkingen tussen ionen en neutrale deeltjes. De resulterende reactie producten vormen exotische moleculen, zoals onverzadigde koolstofketens, die in onze eigen atmosfeer niet voorkomen.

Wanneer de dichtheid in de wolk toeneemt, verandert de chemie. Meer en meer gasfase deeltjes vriezen vast op de koude stofdeeltjes en vormen aan het oppervlak een laagje ijs. Zelfs koolstofmonoxide kan bij de lage temperaturen in de wolk ($-263\text{ }^{\circ}\text{C}$) vastvriezen op de stofdeeltjes. Atomair en moleculair waterstof vriest bij nog lagere temperaturen vast, maar kan bij ook wat hogere temperaturen kortstondig op een oppervlak vertoeven en is daarbij zeer mobiel. Dit vormt de basis voor een andere chemie – in de vaste stof – waarbij moleculen ontstaan door reacties van waterstof met andere moleculen (of zichzelf) die zitten vastgevroren op het oppervlak. In reacties van waterstof atomen met zuurstof wordt water gevormd en waterstof atoom interacties met koolmonoxide ijs leidt tot de vorming van formaldehyde en methanol. Op het moment dat de protoster begint te stralen bevat het circumstellaire ijs vooral water, koolstofmonoxide, koolstofdioxide, en in mindere mate methaan, methanol en ammoniak. De bouwstenen voor een complexe organische chemie bevinden zich dus in het ijs aan het oppervlak van circumstellaire stofdeeltjes die zelf het materiaal vormen waaruit planeten ontstaan.

Meer complexe moleculen, zoals ethanol, ontstaan vervolgens in het ijs door de bestraling met ultraviolet licht dat afkomstig is van de protoster en kosmische achtergrondstraling (Figuur 2). Ook thermische effecten, waarbij het ijs opwarmt, spelen een rol. Ijs dat zich in de buurt van de protoster bevindt, sublimiert, waarmee een volgende chemische fase wordt ingeleid: vaste stof reactieproducten kunnen nu met elkaar en reeds voorhanden moleculen in de gasfase reageren. Ijs dat niet verdampt wordt uiteindelijk een bestanddeel van kometen en planeten. Vaste stof astrochemische processen tijdens stervorming bepalen derhalve ook de chemische ontwikkeling van planeten.

Met behulp van spectroscopie is het mogelijk deze chemische evolutie waar te nemen; moleculen absorberen of emitteren licht bij zeer specifieke golflengtes. Het resulterende spectrum is uniek. Door bv. absorptiesignalen te meten in sterlicht dat door een interstellaire wolk of circumstellaire schijf heengaat, kan de dichtheid van een bepaald molecuul worden gemeten. Hiervoor is het wel noodzakelijk dat de spectrale eigenschappen van een molecuul bekend zijn en dit is te realiseren met laboratorium metingen. In het laboratorium worden ook de chemische processen onderzocht die onder astronomische omstandigheden een belangrijke rol spelen. Dit is noodzakelijk omdat chemische processen in de ruimte zeer langzaam plaatsvinden. Astronomische waarnemingen laten 'snap-shots' zien van verschillende fases in de chemische evolutie in het heelal. Met laboratorium werk is het mogelijk deze 'snap-shots' in een compleet beeld in te passen.



Figuur 2 – Een schematische weergave van de ijs evolutie tijdens ster- en planeetvorming. In donkere wolken wordt ijs gevormd bestaand uit eenvoudige componenten (a, b.i). Warmte en UV straling van de protoster veroorzaken een complexer ijs mengsel (b.ii), dat in de buurt van de protoster verdampt (b.iii). Ijs dat niet verdampt eindigt in de proto-planetaire schijf (c) en vormt het materiaal waaruit planeten en kometen ontstaan (d).

Vaste stof laboratorium astrofysica

Vaste stof astrofysisch laboratorium onderzoek heeft twee doelstellingen: spectra van ijs zijn nodig om astronomische waarnemingen te interpreteren en fysisch-chemische informatie is nodig om de processen te karakteriseren die een rol spelen tijdens de vorming van sterren en planeten. Ijs spectroscopie wordt vooral in het infrarood toegepast. De infrarode spectra hangen af van het soort ijs, bv. water of koolstofmonoxide, en of het ijs puur is of gemengd met andere moleculen. Een vergelijk tussen een laboratorium en astronomisch spectrum laat zien welk soort ijs een rol speelt tijdens stervorming en of het gelaagd of gemengd ijs betreft.

De tweede doelstelling – het simuleren van astrofysische en astrochemische processen onder laboratorium gecontroleerde en astronomisch relevante omstandigheden – vereist dat experimenten onder zeer goede vacuum condities en bij zeer lage temperaturen plaatsvinden. De druk in de dichtste interstellaire wolken is nog steeds bijzonder laag en vergelijkbaar met het beste vacuum dat op Aarde kan worden gerealiseerd. In het laboratorium worden daarom ultra-hoge vacuum systemen gebruikt waarin ijs op een helium gekoeld oppervlak tot $-260\text{ }^{\circ}\text{C}$ kan worden afgekoeld. Door de invloed van straling en warmte

te bestuderen is het mogelijk te voorspellen hoe een vergelijkbaar inter- of circumstellair ijs op straling en warmte in de ruimte reageert. Laboratorium werk maakt het mogelijk astronomische waarnemingen te interpreteren. De waarnemingen leveren wederom informatie waaruit nieuwe experimenten voortvloeien. De conclusies die daaruit volgen worden met nieuwe waarnemingen getest. De kring is rond. Dit proefschrift is op een identieke wijze opgebouwd.

Dit proefschrift: complexe processen in eenvoudige ijzen

Ijzen spelen dus een belangrijke rol gedurende de verschillende fases van ster- en planeetvorming, van interstellaire wolken tot kometen zoals we die kennen uit eigen zonnestelsel. Hun evolutie is bepalend voor de chemie zoals die op Aarde plaatsvindt. Hun evolutie bepaalt op dit moment ook de toekomstige chemie in planetenstelsels rond andere sterren. Ook de vraag hoe het leven op Aarde is ontstaan en hoe waarschijnlijk het is, dat leven elders is of zal ontstaan, kan alleen worden beantwoord wanneer duidelijk is welke rol inter- en circumstellair ijs daarbij speelt. Het overkoepelend doel van dit proefschrift is om astronomische waarnemingen en laboratorium experimenten te combineren en te begrijpen hoe ijs vormt, hoe het verandert en hoe het verdampt. De belangrijkste conclusie die uit dit onderzoek volgt is, dat het mogelijk is om in eenvoudige ijzen de complexe processen die optreden tijdens verhitting, bestraling met UV licht of wisselwerking met andere ijs deeltjes, kwantitatief te beschrijven. Dit is de voorwaarde om deze processen in astrochemische modellen mee te nemen en middels waarnemingen te testen. Zeker nu in de komende jaren nieuwe waarnemingsfaciliteiten operationeel worden, waarmee de evolutie van ijs in de verschillende fases gedetailleerd in beeld kan worden gebracht.

Met de lancering van de Spitzer ruimte telescoop, enkele jaren geleden, werd het voor de eerste keer mogelijk om ijs te onderzoeken rond jonge sterren met een massa vergelijkbaar met die van onze eigen zon. Tot dan toe waren alleen veel zwaardere sterren observationeel toegankelijk. Uit dit onderzoek van ijs rond een groot aantal protosterren volgt dat eenvoudig ijs – met water, methaan en methanol – wordt gevormd in een reeks opeenvolgende processen: hydrogenatie van atomen, accretie op het oppervlak, hydrogenatie van koolstofmonoxide, zuurstof en stikstof addities en diffusie in de buurt van de protoster. Hoe later een molecuul vormt in deze reeks, des te meer variatie wordt er gevonden in de molecuulabundanties voor verschillende bronnen. Dit is bv. het geval voor methanol en de organische chemie op exo-planeten kan dus behoorlijk verschillen van die op onze eigen planeet (Hoofdstukken 2 en 3).

De invloed van warmte en ijs compositie op de dynamica van waterrijk ijs wordt behandeld in Hoofdstukken 4–6. Laboratorium werk aan ijs levert spectroscopische data en gegevens waarmee segregatie en desorptie worden gekarakteriseerd. Door koolstofdioxide (CO₂) toe te voegen aan waterijs wordt de ijs matrix van waterstofbruggen danig verstoord, hetgeen resulteert in significante spectrale veranderingen van de water ijs absorpties.

Voordat gemengd H₂O-CO₂ ijs sublimeert tijdens verhitting, verandert eerst de struc-

tuur waarbij water en koolstofdioxide worden gescheiden. Deze segregatie maakt het mogelijk om de verwarming van ijs gedurende stervorming zichtbaar te maken. Daarmee kan segregatie worden gebruikt als een thermische methode om de evolutie van een protoster te beschrijven. De segregatie van ijsmengsels van water met koolstofmonoxide of koolstofdioxide vindt plaats door middel van een snel diffusieproces aan de oppervlakte van het ijs, gevolgd door een langzamer diffusieproces in de rest van het ijs. De water en koolstofdioxide segregatie is veel sneller dan tot nu toe werd aangenomen en wordt in een proto-stellare omgeving reeds relevant bij temperaturen van rond de 30 K (- 243 °C), waarmee kan worden verklaard dat er puur koolstofdioxide ijs wordt waargenomen rond protosterren.

Een ander effect dat optreedt bij verwarming is de verdamping van ijs, waardoor moleculen in de gasfase terecht komen. Uit laboratorium studies volgt dat een gemengd en puur ijs op sterk verschillende wijze verdampen. Vooral de aanwezigheid van vluchtige stoffen in water ijs wordt als een belangrijk uitgangspunt gezien, dat bepalend is voor de gas samenstelling in de schijf of de ijs samenstelling in kometen. Kwantitatieve data ontbreken grotendeels. Door systematisch H₂O ijs van CO₂ en CO te voorzien, hebben we een model ontwikkeld waarmee het mogelijk is om het proces voor verschillende laboratorium omstandigheden weer te geven en toe te passen op astronomische omstandigheden. Hiermee is het voor de eerste keer mogelijk gebleken de verdamping van ijsmengsels zoals gemeten in het laboratorium te koppelen aan astrofysisch modellen.

Ijs kan ook verdampen als gevolg van UV bestraling (Figuur 2). Hierdoor kunnen – ongeacht de heersende temperaturen – moleculen vanuit het ijs in de gasfase worden gebracht, d.w.z. ook voor temperaturen onder de sublimatie temperatuur. Theoretische studies voorspellen echter dat UV fotodesorptie alleen efficiënt is na voorafgaande UV fotodissociatie, en verwaarloosbaar langzaam in alle andere gevallen. Hoofdstukken 7 en 8 laten echter zien, dat de UV fotodesorptie snelheden van koolstofmonoxide – dat niet dissocieert – en koolstofdioxide – dat wel uiteenvalt – vergelijkbaar zijn. Water en methanol ijs blijken ook efficiënt te fotodesorberen (Hoofdstukken 9 en 10). Dit verklaart astronomische waarnemingen van water, koolstofmonoxide en methanol in de gasfase bij temperaturen waarbij deze zouden moeten zijn vastgevroren op stofdeeltjes.

UV bestraling van ijs kan ook een complexe fotochemie initiëren waarbij het uiteenvallen van ijs moleculen aan de basis staat van nieuwe chemische reacties. Dit is voor de eerste keer kwantitatief onderzocht voor methanol ijs en verschillende ammoniak houdende ijs mengsels (Hoofdstukken 10 en 11). De fotochemie van methanol ijs wordt gezien als de bron waaruit complexe moleculen rond protosterren vormen. Astronomische gasfase waarnemingen laten inderdaad een veelvoud aan chemische producten zien – organische zuren, esters, ethers en suikers – in de nabijheid van jonge sterren waar ijs wordt bestraald met UV licht en thermisch verdampt (Figuur 2). Het is tot nu toe niet mogelijk geweest om deze hypothese te testen, omdat kwantitatieve informatie niet voorhanden was. In Hoofdstuk 10 wordt aangetoond dat alle astronomische geïdentificeerde complexe moleculen door fotochemische reacties in methanol ijs kunnen ontstaan. De waargenomen verhoudingen voor verschillende astronomische omgevingen blijken te kunnen worden verklaard door de opeenvolgende vorming van moleculen voor toenemende temperaturen. De laboratorium resultaten zijn ook consistent met de relatieve hoeveelheden aan com-

plexe moleculen die in kometen zijn aangetroffen. Dit is mogelijkwijze gerelateerd aan de oorsprong van een pre-biotische chemie in ons zonnestelsel.

Hoofdstuk 11 bouwt hierop voort met vergelijkbaar onderzoek aan ammoniak houdend ijs met het doel ook de pre-biotisch relevante stikstof chemie te bestuderen. De belangrijkste conclusie is dat complexe ijs chemie, resulterend in de vorming van bv. eenvoudige aminozuren, kan worden beschreven, uitgaande van eenvoudige ijsmengsels die twee i.p.v. zes van de belangrijkste bestanddelen van inter- en circumstellair ijs bevatten. Dit maakt het mogelijk om de pre-biotische evolutie van aminozuren en organische suikers uiteindelijk te voorspellen.

Astronomische ijs waarnemingen laten alleen spectra zien van de meest voorkomende (en veelal dus minder complexe) moleculen. Complexere moleculen kunnen niet rechtstreeks in de vaste stof worden geïdentificeerd. Het is wel mogelijk om deze moleculen in de gasfase waar te nemen onder de aanname dat het verdampte ijs producten betreft. In het geval van thermische verdamping is dit problematisch. De benodigde hogere temperaturen zijn niet typisch voor de koude fases in het stervormingsproces. Bovendien is het moeilijk om dan gasfase reactieproducten te koppelen aan oorspronkelijk ijs bestanddelen. De situatie is anders bij verdamping door middel van UV bestraling of een ander niet-thermisch proces. In dit geval kunnen gasfase moleculen bij lagere temperaturen worden gebruikt als een analytische probe voor de oorspronkelijke ijs samenstelling. Dit is het onderwerp van Hoofdstuk 12, waar in een proefstudie de gas en ijs abundanties van twee moleculen worden vergeleken voor een reeks van protosterren. De resultaten zijn in overeenstemming met een model waarin de ijs moleculen constant door UV straling in de gasfase worden gebracht, maar een groter aantal protosterren is nodig om dit éénduidig te kunnen concluderen.

