



Universiteit  
Leiden

The Netherlands

## Ice and gas in protostellar clouds and planet-forming disks: a combined laboratory and observational study

Terwisscha van Scheltinga, J.

### Citation

Terwisscha van Scheltinga, J. (2021, November 30). *Ice and gas in protostellar clouds and planet-forming disks: a combined laboratory and observational study*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/3245869>

Version: Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/3245869>

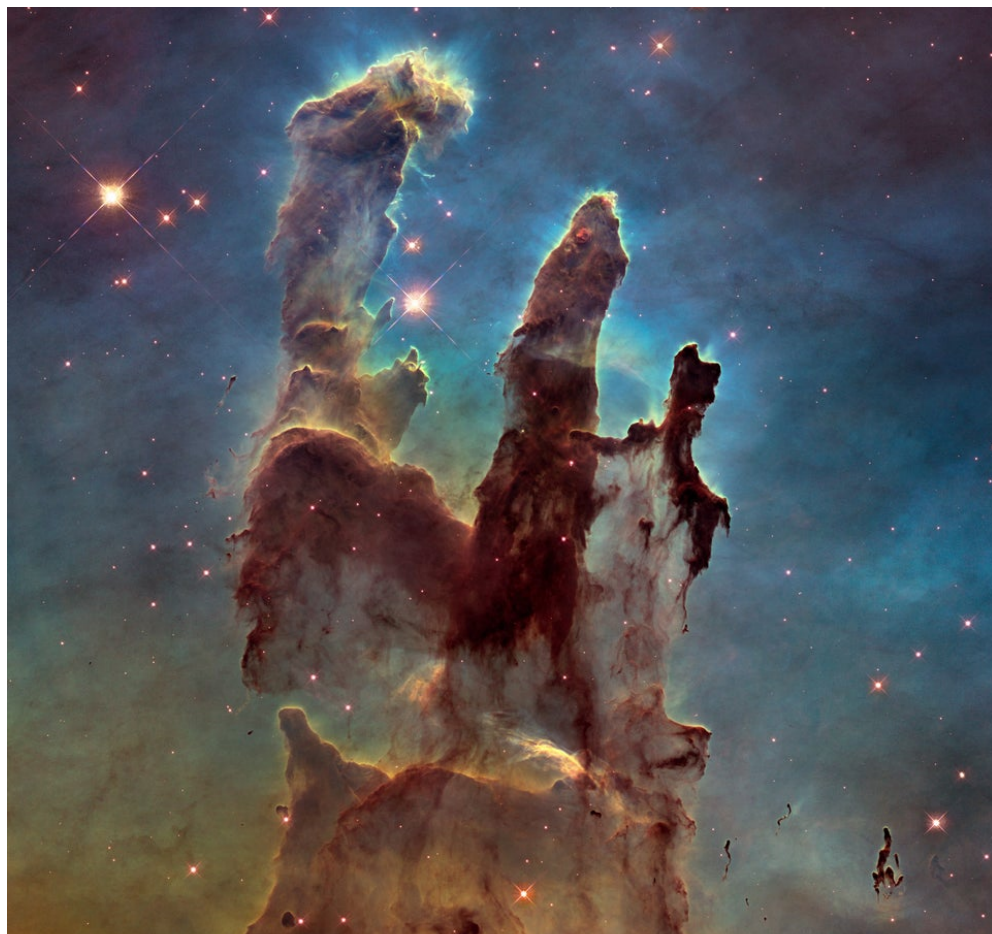
**Note:** To cite this publication please use the final published version (if applicable).

## NEDERLANDSE SAMENVATTING

Het is gemakkelijk om in de drukte van ons dagelijkse leven te vergeten hoe bijzonder onze aarde is. Een relatief kleine planeet die ongeveer 4,6 miljard jaar geleden is gevormd op de juiste afstand van de zon, en waar sindsdien alles precies zo is verlopen dat wij en elk ander levend wezen kunnen bestaan. Kijk je op een heldere nacht omhoog naar alle sterren die aan de hemel staan, dan stel je vrijwel automatisch de vraag, is de aarde de enige plek in het heelal waar leven is ontstaan? Inmiddels zijn er bijna 5000 exoplaneten ontdekt en weten we dat gemiddeld elke ster minstens één planeet heeft. Een zeer groot deel van deze planeten zal niet geschikt zijn voor leven of in ieder geval het leven zoals wij dat kennen. Dit komt omdat de temperatuur op het oppervlak veel te hoog of te laag is, of doordat de atmosfeer niet geschikt is, denk bijvoorbeeld aan giftige gassen of een te hoge druk. Echter, de hoeveelheid sterren in ons heelal is enorm groot. Het is daarom bijna niet denkbaar, dat er geen andere plek in ons universum is waar, net als op aarde, de fysieke en chemische omstandigheden ook ideaal zijn voor het ontstaan van leven.

Om tot een levend organisme te komen zijn er bepaalde organische bouwstenen nodig. Deze moleculen zijn nodig zodat organismes, eencellig en meercellig, kunnen overleven, gedijen, reproducieren en evolueren. Denk hierbij aan bouwstoffen zoals eiwitten, nucleïnezuren, koolhydraten en lipiden. De grote vraag is, zijn deze organische bouwstenen op aarde gevormd, of waren ze al aanwezig voordat planeten ontstonden? In het laatste geval zou dit kunnen betekenen dat het hele universum gevuld is met de bouwstenen van het leven.

In de laatste 100 jaar is ons begrip van de fysische en chemische processen in het universum significant verbeterd. Eerst dacht men dat onder de extreme condities in de ruimte, dat wil zeggen, zeer lage en zeer hoge temperaturen en intense stralingsvelden, moleculen maar moeizaam gevormd kunnen worden. Inmiddels zijn er meer dan 240 verschillende moleculen ontdekt! Een subgroep van deze moleculen zijn de zogenaamde complexe organische moleculen, ook wel COMs genoemd. Dit zijn moleculen met zes of meer atomen, waarvan minstens één een koolstof atoom is en één ander een zuurstof, stikstof, fosfor of zwavel atoom is. COMs zijn van bijzonder belang omdat zij de kleinere versie zijn van de hiervoor genoemde organische bouwstenen. Door COMs te bestuderen in de ruimte krijgen wij een beter beeld van hoe het leven is ontstaan op aarde, en dus mogelijk ook rondom andere sterren.



**Figuur 1:** De ‘Pilaren der Creatie’ die deel uitmaken van de Adelaarsnevel in het sterrenbeeld ‘de slang’, gezien door de *Hubble* ruimtetelescoop. Deze moleculaire wolken zijn donker omdat zij bestaan uit koud gas en stof dat licht van achtergelegen sterren tegenhoudt. De intense kleuren aan de randen van de wolk komen door de interactie van intense straling van nabij gelegen sterren met het stof en gas aan de buitenkant van de moleculaire wolken (Credit: ESA).

## Hoe vormen sterren en planeten?

In verhouding tot de leeftijd van ons zonnestelsel worden nieuwe sterren en planeten relatief snel gevormd. Echter, dit proces duurt nog steeds enkele miljoenen jaren en start in een moleculaire wolk. Zo’n moleculaire wolk bestaat uit koud gas en stofdeeltjes, en is vele malen groter dan een planeetstelsel, zo’n 100.000 keer, en in deze wolk kunnen duizenden nieuwe sterren ontstaan. Een voorbeeld van zo’n wolk is de ‘Pilaren der Creatie’, zie Figuur 1. Het gas en stof in deze wolk is niet uniform verdeeld, en dus worden, onder invloed van hun eigen zwaartekracht, de dichte gebieden steeds dichter. Wanneer genoeg materiaal is samengetrokken in een gebied wordt dit een *prestellaire kern* genoemd. Uiteindelijk hoopt het materiaal in zo’n kern zich op rond het gravita-



**Figuur 2:** Visualisatie van de evolutie van moleculaire wolk naar jong planetenstelsel. Een deel van een moleculaire wolk (linksboven) trekt samen onder zijn eigen zwaartekracht en begint uit het beschikbare materiaal een *protoster* en een kleine draaiende schijf te vormen (rechtsboven). Naarmate meer materiaal invalt op de *protoster* groeit ook de *protoplanetaire schijf* (linksonder). Uiteindelijk start kernfusie in de jonge ster en wordt het resterende gas en stof weggeblazen (rechtsonder). Wat overblijft zijn de planeten die in de *protoplanetaire schijf* zijn gevormd (Credit: Bill Saxton, NSF/AUI/NRAO).

tionele centrum en vormt het daar een puntbron, ook wel bekend als een *protoster*. Het initiële materiaal van de moleculaire wolk heeft een bepaald impulsmoment en dit moet worden behouden tijdens het vormen van een ster. Dit heeft tot gevolg dat er rondom de *protoster* een schijf van gas en stof ontstaat. Daarnaast stroomt ook materiaal weg van de *protoster*. Deze zogenaamde *jets* staan loodrecht op de schijf en werpen met hoge snelheden materiaal terug het *interstellaire medium* in. Op dit moment in het vormingsproces vindt er nog geen kernfusie plaats in de *protoster* en wordt het omliggende materiaal voornamelijk verwarmd door de gravitationele energie die vrijkomt bij het invallen van materiaal op de *protoster*. Naarmate meer van het omliggende materiaal invalt op de *protoster* neemt de massa en temperatuur toe en blijft er alleen nog een schijf van gas en stof over die om de protoster heen draait. Deze schijf wordt ook wel de *protoplanetaire schijf* genoemd, en het is in deze schijf waar van het resterende interstellaire materiaal planeten worden gevormd. Uiteindelijk zal kernfusie van waterstof gaan plaats vinden in de ster en wordt de meerderheid van het stof en gas terug geblazen in het *interstellaire medium*. Het overgebleven materiaal wordt aangetrokken door de jonge planeten en zo vormt een jong planetenstelsel. Deze evolutie van moleculaire wolk naar een jong planetenstelsel is weergegeven in Figuur 2.

## Astrochemie

Tot nu toe hebben wij vooral gekeken naar de fysische evolutie van materiaal op grote schaal, maar wat gebeurt er op moleculair niveau? Het gas in een wolk bestaat voornamelijk uit waterstof, maar bevat ook atomen zoals koolstof en zuurstof, en simpele moleculen zoals koolstofmonoxide (CO). De stofdeeltjes zijn klein, typisch een paar tienden tot enkele  $\mu\text{m}$ , en bestaan voornamelijk uit silicaten en koolstofhoudende moleculen zoals grafiet en polycyclische aromatische koolwaterstoffen. Door de dichtheid van het stof in de wolken wordt externe straling tegengehouden en daalt de temperatuur naar 10 K (-263 °C). De lage temperatuur van de stofdeeltjes zorgt ervoor dat gasfase deeltjes - atomen en moleculen - kunnen vastvriezen, waarbij een laagje ijs ontstaat. In dit laagje ijs vinden chemische reacties plaats die in de gasfase niet plaats vinden of veel minder efficiënt zijn. De reden hiervoor is dat de ijslaag niet alleen een molecuul reservoir is, maar ook fungeert als oppervlakte katalysator. De overtollige reactie energie wordt daarbij door het ijs geabsorbeerd en stabiliseerd het molecuul, iets wat, als gevolg van de lage dichtheden, in de gasfase veel moeilijker is.

Door toevoeging van atomen aan simpele moleculen kunnen verschillende nieuwe moleculen ontstaan, waaronder COMs. Ook invallende straling of vrije elektronen kunnen chemische reacties initiëren en zo nieuwe moleculen vormen. Gelijktijdig, kunnen UV fotonen of hoog geladen kosmische straling ook moleculen in het ijs uiteen laten vallen. De overgebleven radicalen zijn reactief en reageren dan met andere moleculen om zo tot grotere moleculen te komen. Om een voorbeeld te noemen, bij de zeer lage temperaturen in een donkere wolk, kunnen CO moleculen met waterstof atomen reageren die over een ijsoppervlak bewegen. Daarbij ontstaan formaldehyde ( $\text{H}_2\text{CO}$ ) en methanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ). Vervolgens kan, door interactie met een UV foton, de binding tussen de methylgroep ( $\text{CH}_3$ ) en hydroxylgroep (OH) in methanol gebroken worden. Het methylradicaal kan een reactie aangaan met een nabij gelegen hydroxymethyl ( $\text{CH}_2\text{OH}$ ) radicaal, insgelijks gevormd door interactie tussen UV en methanol, en zo ethanol ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ) vormen. Een 'cruciaal' molecuul dat regelmatig door intelligent leven op aarde wordt genuttigd en het universum zit er vol mee. Op vergelijkbare manier worden ook andere organische bouwstenen als glycine ( $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ , een aminozuur) en glycolaldehyde ( $\text{HOCH}_2\text{CHO}$ , het simpelste suiker) gevormd in radicaal molecuul reacties in en op de ijslagen van interstellaire stofdeeltjes.

## Laboratorium en telescopen

Hoe weten wij eigenlijk dat deze organische bouwstenen gevormd worden in de vroege stadia van ster- en planeetformatie? Het is immers niet mogelijk om even langs te gaan en op locatie wat metingen te verrichten. Dit kan op verschillende manieren, namelijk door de chemie te bestuderen onder vergelijkbare omstandigheden in gespecialiseerde experimentele opstellingen, door met (ruimte)telescopen deze gebieden spectroscopisch te bestuderen of door middel van computersimulaties. In dit proefschrift zijn zowel telescopen en laboratorium opstellingen gebruikt, zie Figuur 3 en 4, om tot een beter begrip te komen van de processen die bepalend zijn voor de chemische evolutie.

Beide maken gebruik van spectroscopie en zijn gebaseerd op de interactie van licht met materie. Afhankelijk van het materiaal en de energie van een foton zijn er verschillende uitkomsten. Bijvoorbeeld, fotonen in het optische gebied worden gereflecteerd op wit papier, terwijl hetzelfde licht zal worden geabsorbeerd door zwart papier. Dit

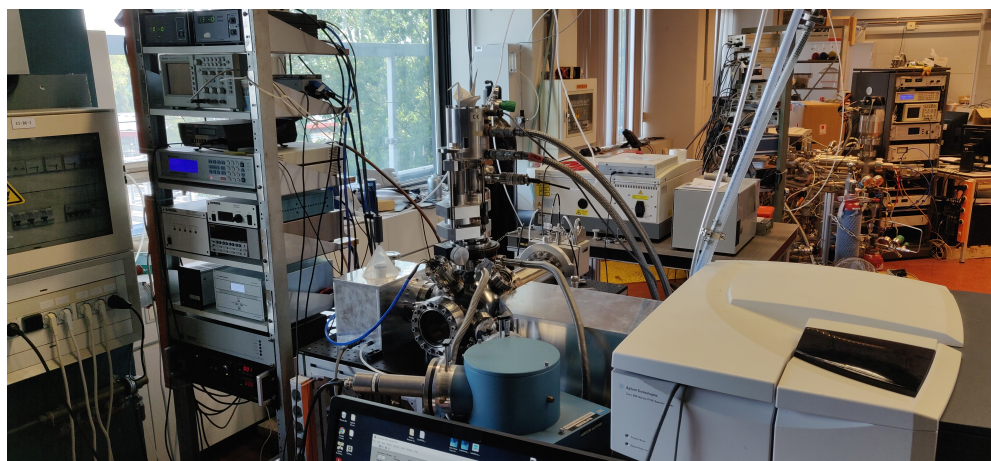


**Figuur 3:** Foto van de Atacama Large Millimeter/submillimeter Array in de Atacama woestijn in Chili. Deze telescoop is gebruikt voor het werk gepresenteerd in hoofdstuk 5 (Credit: ESO/NAOJ/NRAO).

werkt niet alleen met zichtbaar licht, maar ook met infrarood en microgolf fotonen. Door de absorptie van een infrarood foton kunnen moleculen gaan trillen (vibreren), terwijl de absorptie van een microgolf foton ervoor zorgt dat een molecuul gaat draaien (roteren). Echter, een molecuul absorbeert niet willekeurig op elke golflengte fotonen, maar absorbeert alleen fotonen met golflengtes die kenmerkend zijn voor dat molecuul, een soort moleculaire vingerafdruk. Daarnaast kunnen moleculen ook fotonen uitzenden, en ook dit gebeurt bij specifieke golflengtes. Dit komt omdat moleculen liever geen overtallige energie hebben, en door fotonen uit te zenden raken zij deze energie kwijt. De verzameling van al die golflengtes wordt een spectrum genoemd en is uniek voor verschillende moleculen. Ken je het spectrum van een molecuul, dan kun je dit overal herkennen.

Astronomen gebruiken (ruimte)telescopen om spectra te meten van onder andere ster en planeet vormende gebieden. Uit deze spectra leiden zij dan af welke moleculen aanwezig zijn, en gelijktijdig wordt er informatie verkregen over eigenschappen zoals de temperatuur en de dichtheid van het materiaal. Deze informatie is belangrijk omdat het als vergelijkingsmateriaal wordt gebruikt met computersimulaties van zulke gebieden. Tijdens dit promotieonderzoek is onder andere gebruik gemaakt van de Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) telescoop, zie Figuur 3. De ALMA telescoop combineert 66 verschillende antennes om zo in het radio domein met hoge ruimtelijke en spectrale resolutie moleculen in de ruimte waar te nemen. ALMA is een interferometer. Dit betekent dat het geen directe afbeeldingen maakt van objecten, echter, elke antenne meet een signaal van het object aan de hemel met een fase en amplitude. Al deze losse signalen worden aan elkaar gekoppeld door middel van een *correlator*, en zo kan een beeld worden gereconstrueerd van het object dat is waargenomen. De kracht van ALMA is dat het deze reconstructies kan maken voor elke golflengte die het waarneemt. Moleculen rondom een jonge ster worden dan in beeld gebracht door naar frequenties te kijken die specifiek zijn voor een bepaald molecuul. Door deze moleculen in kaart te brengen, krijgen wij een beter beeld van de chemische inventaris en de fysische eigenschappen in jonge ster- en planeetvormende gebieden.





**Figuur 4:** Foto van de experimentele opstelling CryoPAD2 in het Laboratorium voor astrofysica van de Sterrewacht te Leiden.

In veel astrofysische laboratoria wordt spectroscopie gebruikt om te achterhalen welke processen plaats vinden onder astrofysische omstandigheden. In dit promotieonderzoek is voornamelijk infrarood spectroscopie toegepast om de vorming van moleculen in de vaste stof te onderzoeken en te kijken hoe verschillende moleculen invloed op elkaar uitoefenen in de vaste stof. Om moleculen in de vaste fase te krijgen onder astrofysische omstandigheden zijn gespecialiseerde opstellingen nodig. In het algemeen bestaan deze uit een roestvrij stalen kamer met daaraan de verschillende instrumenten gekoppeld. Deze kamer wordt tot extreem lage drukken ( $< 10^{-10}$  mbar) gepompt door een turbomoleculaire pomp. Hierdoor is CryoPAD2 één van de leegste plekken van Nederland. Om dit te visualiseren, stel je voor dat het hele IJsselmeer volledig wordt gelegeerd en vervolgens gelijkmatig wordt gevuld met een halve liter water en niks anders. Daarnaast worden de moleculen in de opstelling gekoeld naar  $-258$  °C,  $15$  °C boven het absolute nulpunt, hetgeen de temperatuur nabootst van de koude stofdeeltjes in de ruimte. Onder deze omstandigheden kan gecontroleerd onderzocht worden hoe moleculen elkaar beïnvloeden en hoe nieuwe moleculen vormen onder invloed van bestraling. Voor die bestraling wordt weer een speciale lamp gebruikt, die het ultraviolette licht nabootst zoals dat in de ruimte voorkomt. Uiteindelijk worden laboratorium, waarnemingen en simulaties samengevoegd om zo tot een beter inzicht te komen over beschikbaarheid van organische bouwstenen in ster- en planeetvormende systemen.

## Conclusies van dit proefschrift

In dit proefschrift zijn stappen gezet naar een beter begrip van de interactie tussen (organische) moleculen in de gasfase en vaste stof tijdens de vorming van nieuwe sterren en planeten. Het is algemeen geaccepteerd dat de meeste COMs gevormd worden in de ijslagen op interstellair stofdeeltjes. Tot op heden zijn vrijwel alle COMs alleen in de gasfase geïdentificeerd. Dit is deels een gevolg van het feit dat waarnemingen van gasfase spectra vele malen gevoeliger en molecuul specifiek uitgevoerd kunnen

worden. Daarnaast is een meerderheid van deze gasfase COMs gedetecteerd in warmere gebieden waar de vaste stof moleculen zijn gesublimeerd. In koude gebieden is het nog steeds niet helemaal duidelijk hoe de transitie van ijs naar gas verloopt. Met de lancering van de *James Webb* ruimtetelescoop (JWST) komt hier verandering in. Deze infrarood ruimtetelescoop is vele malen gevoeliger dan zijn voorgangers en maakt het mogelijk om met grotere nauwkeurigheid ook ijs in de ruimte te bestuderen. Ter voorbereiding op toekomstige vaste stof waarnemingen met de JWST zijn in hoofdstukken 3 en 4 infrarood ijs spectra gemeten van acetaldehyde, dimethylether, ethanol en methylformiaat in de pure vorm, maar ook gemengd met astronomisch relevante moleculen. De uitgebreide karakterisatie in deze hoofdstukken vormt een sterke basis voor astronomen om uit de JWST spectra af te leiden welke COMs zich in het ijs bevinden. In de nabije toekomst zal deze informatie tot een beter beeld leiden van de organische ijs inventaris.

Het enige COM dat tot op heden wel is gedetecteerd in de vaste stof is methanol, en zoals eerder vermeld wordt methanol gevormd via hydrogenatie van CO op de stofdeeltjes in het ijs. Computersimulaties van een *protoplanetaire schijf* suggereren dat methanol in de vaste stof gedeeltelijk naar de gasfase zou moeten sublimeren. Echter, gasfase observaties van *protoplanetaire schijven* laten deze voorspelde hoeveelheid gasfase methanol niet zien. Om hier een beter beeld van te krijgen kan naar het tussenliggende product gekeken worden, namelijk formaldehyde ( $\text{H}_2\text{CO}$ ). Gasfase formaldehyde is volop aanwezig in *protoplanetaire schijven*, echter, naast vorming in de vaste stof kan formaldehyde ook efficiënt gevormd worden in de gasfase. In hoofdstuk 5 zijn meerdere rotationele transitie van gasfase formaldehyde met ALMA onderzocht. Uit de waarnemingen en analyse daarvan is de fysische structuur, de temperatuur en hoeveelheid formaldehyde gas in de *protoplanetaire schijf* van de jonge ster TW Hya berekend. Deze resultaten geven aanwijzingen dat het geobserveerde gasfase formaldehyde in TW Hya in de gasfase is gevormd, en dus waarschijnlijk niet chemisch gerelateerd is aan het proces dat methanol vormt in het ijs op de stofdeeltjes. Dit werk in TW Hya vormt een uitgangspunt voor een algemeen beter begrip van de oorsprong van formaldehyde in ster- en planeetvormende gebieden.

Tijdens de evolutie van een moleculaire wolk naar een jong planetenstelsel zijn er veel fysische en chemische processen die tegelijk plaats vinden en invloed op elkaar hebben. In het algemeen moet de temperatuur van een stofdeeltje lager zijn dan de sublimatietemperatuur van een molecuul om dit molecuul uit te laten vriezen op een stofdeeltje. In hoofdstuk 6 is onder astrofysische omstandigheden in het laboratorium onderzocht of er een reactie kan plaats vinden op het oppervlakte van water ijs, bestraald met UV fotonen, en gasfase CO. Daarbij is de temperatuur van het water ijs boven de sublimatietemperatuur van CO en kan het dus niet uitvriezen bovenop het water ijs. Uit de resultaten blijkt dat dit proces plaats vindt en dit is interessant omdat het laat zien dat gasfase en vaste stof niet als geïsoleerd van elkaar gezien kunnen worden. De interactie tussen gasfase CO en UV bestraald water ijs produceert koolstofdioxide ( $\text{CO}_2$ ) en heeft de potentie om te verklaren waarom in *protoplanetaire schijven* te weinig gasfase CO wordt gezien. Bovendien laten waarnemingen aan ijs in de ruimte zien dat een groot deel van het  $\text{CO}_2$  ijs gemengd is met water ijs, terwijl CO ijs niet is gemengd met water ijs, ook dit is te verklaren met het bovenstaande proces.



De hoofd conclusies van dit proefschrift zijn als volgt:

- Om aceetaldehyde, dimethylether, ethanol en methylformiaat te detecteren met de JWST zijn de volgende infrarood absorptiebanden het meest gunstig: 7.427 en 5.803  $\mu\text{m}$  banden voor aceetaldehyde, de 9.141 en 8.011  $\mu\text{m}$  banden voor dimethylether, de 11.36 en 7.240  $\mu\text{m}$  banden voor ethanol, en de 13.02 en 10.98  $\mu\text{m}$  banden voor methylformiaat. Voor een robuuste waarneming van één van deze moleculen zijn minstens twee absorptiebanden nodig en in de juiste verhoudingen met elkaar.
- Gasfase formaldehyde in ster- en planeetvormende gebieden heeft niet perse dezelfde chemische oorsprong als methanol, namelijk hydrogenatie van CO. De waarnemingen met ALMA rondom TW Hya laten zien dat de eigenschappen van het gasfase formaldehyde consistent zijn met een gasfase oorsprong.
- De interactie tussen gasfase CO en water ijs laat zien dat het niet alleen belangrijk is om te kijken naar de interactie tussen gas en stof op een fysische manier, maar ook chemische manier. Deze interactie is belangrijk omdat het mogelijk effect heeft op onze interpretatie van de hoeveelheid materiaal die aanwezig is voor planeetformatie.
- Tijdens de bestraling van water ijs is naar boven gekomen dat er minder hydroxylradicalen worden gevormd dan gedacht. Dit heeft twee mogelijke oorzaken, namelijk UV fotonen dissociëren water niet met een 100% efficiency of na dissociatie is de recombinatie van waterstof en het hydroxylradicaal efficiënter.

De resultaten die in dit proefschrift zijn gepresenteerd vormen een sterke basis voor ijsobservaties van complexe organische moleculen en dragen bij aan het in kaart brengen van de organische inventaris in ster- en planeetvormende gebieden door de spectra aan te leveren die nodig zijn voor waarnemingen met de JWST. Verder wordt aangetoond dat het voor gasfase formaldehyde mogelijk is om te achterhalen of dit zijn oorsprong vindt in de gasfase of de vaste stof. Tenslotte is experimenteel voor een eerste keer systematisch gekeken naar de wisselwerking tussen gasfase CO en water ijs en het is gebleken dat dit een nieuw reactiekanaal biedt naar CO<sub>2</sub>. Mogelijk is hetzelfde mechanisme actief in andere reacties en dit zal dan van belang zijn om toekomstige modellen verder te verbeteren.