



Universiteit
Leiden
The Netherlands

A song of ice and gas: the formation and evolution of complex organic molecules

Chen, Y.

Citation

Chen, Y. (2026, February 24). *A song of ice and gas: the formation and evolution of complex organic molecules*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/4292644>

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/1887/4292644>

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

Nederlandse Samenvatting

Sterren worden geboren samen met moleculen. Lang voordat een jonge ster zichtbaar wordt, is haar geboorte-omgeving al in stilte nieuwe moleculaire soorten aan het maken onder extreme omstandigheden. Dit proefschrift houdt zich bezig met die verborgen chemische geschiedenis: hoe eenvoudige atomen in het interstellair medium worden omgevormd tot steeds complexere moleculen terwijl sterren ontstaan en evolueren.

Stervorming: een fysisch en chemisch proces

Sterren ontstaan binnen koude, dichte gebieden van de interstellair ruimte die bekendstaan als **moleculaire wolken**. Deze moleculaire wolken behoren tot de koudste en rustigste plaatsen in het heelal, met temperaturen die zo laag zijn (< 10 K, of equivalent, $< -260^\circ\text{C}$) dat beweging vrijwel bevroest. Het zijn echter precies deze kalme, ijzige omstandigheden die het mogelijk maken dat zowel sterren als moleculen zich vormen.

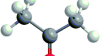
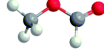
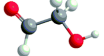
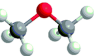
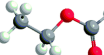
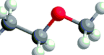
Terwijl de zwaartekracht langzaam materiaal binnen een wolk samenbrengt, wordt het gas dichter en kouder. In dit stadium beginnen atomen en eenvoudige moleculen (bijv. H en CO) zich vast te hechten aan kleine stofkorrels en deze geleidelijk te bedekken met dunne lagen ijs. Hoewel onzichtbaar voor het blote oog, zijn deze ijzige korrels cruciaal voor de voortgaande chemie: zij bieden oppervlakken waarop atomen elkaar kunnen ontmoeten, reageren en uitgroeien tot nieuwe moleculen.

Naarmate de instorting voortduurt, vormt zich een proto-ster in het centrum van de wolk. Terwijl het omringende materiaal geleidelijk wordt verwarmd door de groeiende ster, beginnen de ijsmantels op stofkorrels op te warmen, zich te herschikken en uiteindelijk te verdampen naar de gasfase. Gebieden dicht bij de proto-ster worden compacte reservoirs van warm, molecuul-rijk gas. Deze gebieden, bekend als **hete kernen** of **hete corino's**, zijn de plaatsen waar astronomen één van de rijkste chemie in de ruimte waarnemen.

Complexe organische moleculen: rijzende sterren in de astrochemie

Onder de vele moleculen die in stervormingsgebieden worden aangetroffen, zijn astronomen vooral geïnteresseerd in **complexe organische moleculen**, of **COM's**. Dit zijn koolstofhoudende moleculen die uit ten minste zes atomen bestaan—veel eenvoudiger dan DNA of eiwitten, maar volgens de maatstaven van het heelal al als “complex” beschouwd (zie Fig. 1 voor een voorbeeld van zuurstofhoudende COM's, of O-COM's).

Lange tijd gingen wetenschappers ervan uit dat dergelijke moleculen voornamelijk in de gasfase worden opgebouwd uit eenvoudigere soorten nadat zij van stofkorrels zijn verdampt. In de afgelopen twee decennia hebben laboratoriumexperimenten en astrochemische modellen echter aangetoond dat dit beeld onvolledig is. Veel gasfase-

Alcohol (C-OH)	Aldehyde (C=O-H)	Keton (-C=O-)	Zuur (-C=O-OH)	Ester (-O-C=O-)	Suiker (C=O & -OH)	Ether (-C-O-C-)	Overig
 methanol (CH ₃ OH)	 formaldehyde (H ₂ CO)	 aceton (CH ₃ COCH ₃)	 mierenzuur (HCOOH)	 methylformiaat (CH ₃ OCHO)	 glycolaldehyde (CH ₂ OHCHO)	 dimethylether (CH ₃ OCH ₃)	 keteen (H ₂ CCO)
 ethanol (CH ₃ CH ₂ OH)	 acetaldehyde (CH ₃ CHO)		 azijnzuur (CH ₃ COOH)	 ethylformiaat (C ₂ H ₅ OCHO)		 methoxyethaan (CH ₃ CH ₂ OCH ₃)	 ethyleenoxide (c-C ₂ H ₄ O)
 vinylalcohol (CH ₂ CHOH)	 propanal (CH ₃ CH ₂ CHO)						
 ethyleenglycol (HOCH ₂ CH ₂ OH)							

Moleculen bestudeerd in Hoofdstuk 2
 Moleculen bestudeerd in Hoofdstuk 3
 Moleculen met < 6 atomen

Figuur 1: Overzicht van enkele veelvuldig gedetecteerde zuurstofhoudende COM's (O-COM's), gecategoriseerd op basis van hun functionele groepen. Overgenomen uit Fig. 12 van Maity et al. (2015).

reacties blijken te inefficiënt te zijn om de waargenomen abundanties van COM's te verklaren.

Waarnemingen hebben bovendien laten zien dat gasfase-COM's al aanwezig zijn in extreem koude gebieden voordat protosterren worden geboren, waar vrijwel niets zou moeten kunnen bewegen. Deze ontdekking dwong tot een heroverweging hoe de chemie werkt in de vroege stadia van stervorming. Als gevolg hiervan verschoof meer aandacht naar chemie in de vaste fase op de oppervlakken van stofkorrels, waar atomen en kleine moleculen zich stap voor stap kunnen combineren, zelfs bij zeer lage temperaturen. Latere theoretische studies zijn nog een stap verder gegaan en hebben reactiepaden voorgesteld die geen diffusie van moleculen vereisen, maar in plaats daarvan lokaal verlopen wanneer reactanten naast elkaar worden gevormd.

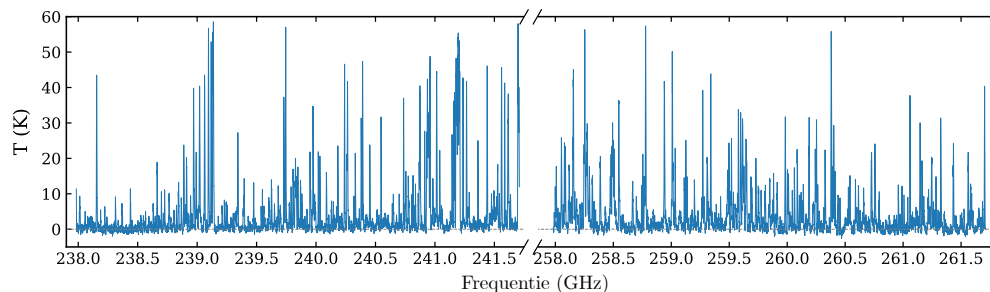
Tegenwoordig wordt de vorming van COM's begrepen als een combinatie van processen die plaatsvinden in koude ijzen, tijdens geleidelijke opwarming, en later in de gasfase. De vraag is nu niet langer of de oppervlaktechemie op stofkorrels van belang is, maar hoe verschillende chemische mechanismen in de loop van de tijd samenwerken.

Het waarnemen van COM's in het gas: de route tot nu toe

Moleculen kunnen zich op verschillende manieren bewegen. Naast de beweging als geheel kunnen zij ook roteren en trillen, waarbij straling met specifieke energieën wordt uitgezonden. Wanneer deze straling wordt gemeten over verschillende golflengten (die representatief zijn voor energieën), vormt zij wat astronomen een **spectrum** noemen. Door een waargenomen spectrum te analyseren, kunnen astronomen vaststellen welke moleculen aanwezig zijn en hun fysische eigenschappen meten, zoals abundantie en temperatuur.

Decennialang hebben astronomen interstellaire moleculen voornamelijk in de gasfase waargenomen, aangezien hun rotatiebewegingen signalen produceren op millimeter-

en submillimeter- (ook wel “radio”-) golflengten die relatief eenvoudig met radiotelescopen kunnen worden waargenomen. Gasfasewaarnemingen zijn vooral krachtig in hete-kerngebieden dichtbij protosterren, waar de ijsmantels van stofkorrels zijn verdampt. Inventarisaties van deze gebieden onthullen een buitengewone rijkdom aan moleculen, vaak met tientallen lijnen die samengepakt zijn binnen kleine frequentiebereiken (zoals te zien is in Fig. 2). In het bijzonder is de Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) revolutionair voor dit vakgebied, doordat deze zowel de gevoeligheid biedt die nodig is om zeldzame moleculen te detecteren als de ruimtelijke resolutie die nodig is om compacte chemische gebieden te isoleren.



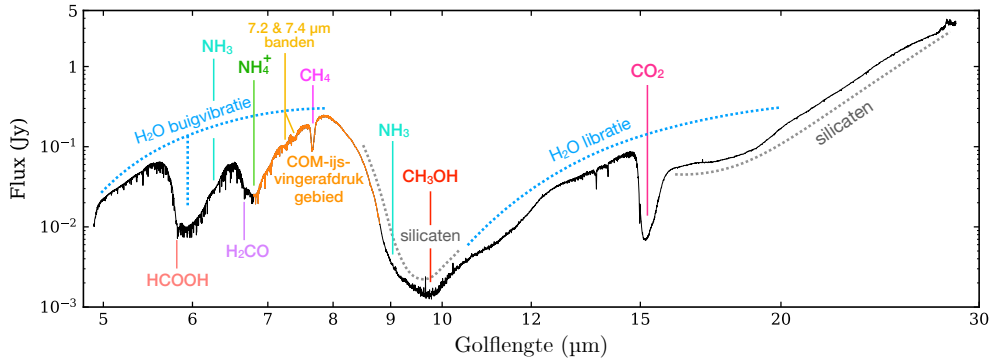
Figuur 2: ALMA-spectrum van G19.88-0.53, één van de massieve hete kernen die zijn bestudeerd in Hoofdstukken 2 & 3. De meeste weergegeven lijnen worden uitgezonden door gasfase-COM's.

Waarnemingen van gasfase-COM's tonen zowel overeenkomsten als verschillen in hun abundanties tussen protostellaire bronnen. De abundantie van sommige COM's (bijv. CH_3OCH_3 en CH_3OCHO) blijft consistent over bronnen met verschillende massa's, terwijl die van andere moleculen (bijv. CH_3CHO en $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) sterker varieert. Dergelijke patronen wijzen erop dat de moleculen onder vergelijkbare omstandigheden zijn gevormd, waarschijnlijk in het allervroegste begin van de stervorming, maar suggereren ook aanvullende reacties nadat moleculen in de gasfase zijn gesublimeerd. Gasfasewaarnemingen kunnen ons echter niet vertellen wat er vóór verdamping is gebeurd—een beperking die kritisch wordt wanneer men de volledige vormings- en evolutie geschiedenis van COM's probeert te begrijpen.

Het waarnemen van COM's in ijs: de ontbrekende helft van het beeld

Hoewel gasfasewaarnemingen zeer krachtig zijn, onthullen zij slechts een deel van de chemische inventaris. In de vroegste stadia van stervorming zijn de meeste moleculen opgesloten in ijsmantels op stofkorrels. Deze ijsen kunnen, in tegenstelling tot hun gasfase tegenhangers, niet roteren en radiogolven uitzenden. In plaats daarvan kunnen ze infrarood (IR) licht via verschillende trillingen, zoals buigen en strekken.

Helaas zijn infraroodwaarnemingen veel moeilijker en vanaf de grond beperkt door de absorptie van de aardatmosfeer. Eerdere infraroodtelescopen detecteerden voornamelijk eenvoudige ijsen (bijv. H_2O , CO en CO_2), waarbij methanol (CH_3OH) eruit sprong als het enige COM-ijs dat overtuigend in de ruimte werd gedetecteerd. Gelukkig heeft de lancering van de *James Webb Space Telescope* (JWST) in 2021 deze



Figuur 3: JWST-spectrum van B1-c, een bekende lage-massa protoster die is bestudeerd in Hoofdstuk 4. De absorptie banden van belangrijke interstellaire ijsen en het vingerafdrukgebied van COM-ijsen (6.8–8.8 μm) zijn in verschillende kleuren aangegeven.

situatie ingrijpend veranderd. Dankzij zijn uitzonderlijke gevoeligheid en spectrale resolutie kan JWST zwakke absorpties detecteren die worden geproduceerd door grotere moleculen (bijv. COM's groter dan methanol) in de vaste fase (zie Fig. 3 voor een JWST-spectrum van een protoster).

JWST-waarnemingen openen een nieuw venster op de chemie in de ruimte, maar brengen ook veel uitdagingen met zich mee. De vingerafdrucken van ijsen, die in infraroodspectra aanwezig zijn in de vorm van “absorptiebanden”, hebben doorgaans geen geïsoleerde en voorspelbare vormen zoals de “emissielijnen” die door gasvormige moleculen worden geproduceerd. Aangezien de profielen van de banden van molecuulair ijs onregelmatig variëren met temperatuur en mengverhoudingen (d.w.z. welke soorten gemengd zijn en in welke verhoudingen), is het meten van hun spectra in laboratoria essentieel voor het analyseren van de waarnemingsgegevens. Als een opkomend vakgebied binnen de astrochemie is de studie van COM-ijsen afhankelijk van een nauwe samenwerking tussen waarnemingen, laboratoriumexperimenten en de voortdurende verfijning van analysemethoden.

Dit proefschrift: het volgen van COM's van ijs naar gas

Het doel van dit proefschrift betreft observationele studies van COM's in zowel gas als ijs met behulp van twee van de krachtigste telescopen ter wereld—ALMA en JWST. Het eerste deel van dit proefschrift (Hoofdstukken 2–3) breidt traditionele studies van gasfase-COM's in individuele bronnen uit naar systematische analyses van grote steekproeven. In het tweede deel (Hoofdstukken 4–5) worden de gasfasewaarnemingen vervolgens verbonden met de nieuw beschikbare waarnemingen van COM-ijsen door JWST. De combinatie van ALMA- en JWST-waarnemingen stelt ons in staat een meer complete ijs-naar-gas-evolutie van COM's te volgen tijdens de vroege stadia van stervorming.

Het eerste deel van dit proefschrift richt zich op ALMA-waarnemingen van gasfase-COM's in de hete kern van een dozijn massieve protosterren. Specifiek bestudeert **Hoofdstuk 2** zes zuurstofhoudende COM's (d.w.z. de in rood gemarkeerde moleculen, met uitzondering van methanol, in Fig. 1) en vergelijkt hun abundantie tussen 14

massieve bronnen en vijf lage massa bronnen. Door deze zes moleculen te normaliseren ten opzichte van methanol (het eenvoudigste en meest abundante COM), toont dit hoofdstuk een contra-intuïtief resultaat: de abundantieverhoudingen tussen deze O-COM's en methanol lijken niet te variëren met de stellaire lichtkracht of massa. Hoewel de abundantieverhoudingen voor verschillende moleculen een uiteenlopende mate van spreiding vertonen, blijven de algemene trends constant over vele ordes van grootte in stellaire lichtkracht.

Hoofdstuk 3 breidt de systematische studie van gasfase-COM's uit Hoofdstuk 2 uit naar aceton (CH_3COCH_3) en propanal ($\text{C}_2\text{H}_5\text{CHO}$), twee grotere O-COM's met drie koolstofatomen die tot nu toe alleen in individuele bronnen zijn bestudeerd. Naast het meten van hun fysische eigenschappen onderzoekt dit hoofdstuk verschillende mogelijke vormingspaden door hun gasfase-abundanties te vergelijken met die van andere mogelijk relevante moleculen, zoals acetaldehyde (CH_3CHO) en keteen (H_2CCO). Dit hoofdstuk vat ook de gasfase-abundantieverbindingen samen tussen methanol en alle acht O-COM's die zijn bestudeerd in Hoofdstukken 2 en 3, en onthult interessante resultaten waaruit blijkt dat aldehyden (moleculen met een $-\text{CHO}$ -groep) in het algemeen minder abundant zijn in de gasfase, terwijl moleculen met CH_3O -radicalen tot de meest abundante O-COM's in waarnemingen behoren. Deze resultaten tonen het belang aan van een systematische analyse en vragen bovendien om meer aandacht voor aceton, een abundant O-COM dat door de astrochemische gemeenschap vaak over het hoofd is gezien.

Het tweede deel van dit proefschrift verlegt de focus van gas naar ijs. **Hoofdstuk 4** laat de mogelijkheid zien om vaste-fase-COM's die groter zijn dan methanol met JWST te detecteren en demonstreert de volledige procedure om de abundantie van COM-ijs te kwantificeren vanuit het zogenoemde "COM-ijs-vingerafdrukgebied" (d.w.z. 6.8–8.8 μm) in JWST-spectra. Dit hoofdstuk presenteert tevens de eerste directe gas-tot-ijs-vergelijking van COM's in dezelfde protostellaire systemen. Door de abundantie van vier veelvuldig gedetecteerde O-COM's in beide fasen te meten, laat dit hoofdstuk zien dat sommige moleculen intact lijken te blijven tijdens de overgang van ijs naar gas, terwijl andere dat niet doen. De resultaten geven aan dat zowel over-erving vanuit ijsen als daaropvolgende reacties in de gasfase een belangrijke rol kunnen spelen bij het vormgeven van de COM-chemie.

Hoofdstuk 5 breidt de studie van het COM-ijs-vingerafdrukgebied uit Hoofdstuk 4 uit naar een grotere steekproef van protostellaire bronnen en ontwikkelt een systematische methode om zwakke ijskenmerken uit infraroodspectra te isoleren. Door de eigenschappen van absorptiebanden (bijv. hun piekposities en breedtes) te meten en deze te vergelijken met laboratoriumgegevens, kunnen de meest plausibele ijssoorten of -mengsels ge-identificeerd worden die verantwoordelijk zijn voor deze banden. Dit hoofdstuk biedt de eerste systematische analyse van het COM-ijs-vingerafdrukgebied en versterkt het bewijs dat chemie in de vaste fase wijdverbreid is tijdens de vroege stervorming.

Toekomstperspectief: een nieuw tijdperk van de astrochemie

We zijn nu een nieuw tijdperk van de astrochemie binnengetrepen. Terwijl ALMA blijft zorgen voor spectra en kaarten van moleculair gas van hoge kwaliteit, heeft JWST de deur geopend naar systematische studies van grotere moleculen in ijs. In plaats van ijschemie indirect af te leiden uit gasfasewaarnemingen, kunnen we nu beide reservoirs

rechtstreeks waarnemen en ze kwantitatief met elkaar vergelijken. In de komende jaren zullen grootschalige waarnemingsprogramma's deze studies uitbreiden naar veel meer bronnen met verschillende massa's. Tegelijkertijd zullen laboratoriumexperimenten en chemische modellen worden ingezet om diepgaandere analyses van waarnemingsgegevens mogelijk te maken. Samen brengen deze ontwikkelingen ons dichterbij het beantwoorden van bredere vragen over de chemische oorsprong van planetaire systemen, en uiteindelijk de processen die tot leven leiden.