



Universiteit
Leiden
The Netherlands

From clouds to comets: tracing the molecular journey of interstellar ices in the JWST era

Slavicinska, K.

Citation

Slavicinska, K. (2026, June 10). *From clouds to comets: tracing the molecular journey of interstellar ices in the JWST era*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/4305137>

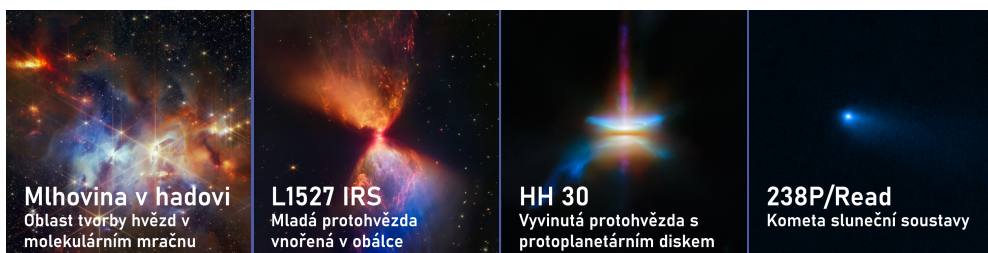
Version: Publisher's Version

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

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/4305137>

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

České shrnutí



Obrázek 1: Čtyři kosmické objekty zachycené Vesmírným dalekohledem *Jamese Webba* (JWST), které představují různé fáze sekvence formování hvězd a planet. Všechna jejich spektra poukazují na chemické složení bohaté na ledové těkavé látky. Kredit snímků: NASA/ESA/CSA/STScI a zleva doprava: 1. Klaus Pontoppidan (NASA-JPL)/Joel Green (STScI). 2. Joseph DePasquale (STScI)/Alyssa Pagan (STScI)/Anton Koekemoer (STScI). 3. Ryo Tazaki et al. 4. Mike Kelley/Henry Hsieh (PSI)/Alyssa Pagan (STScI).

Hluboko ve vzdáleném mezihvězdném prostředí jsou mračna plynu a mikroskopických prachových zrn tvarována fyzikálními procesy do vířících sítí pilířů, globulí a filamentů. Nejrychlejší oblasti těchto mračen jsou z velké části odstíněny od okolního mezihvězdného záření, což vytváří výjimečně chladné a temné podmínky, které jsou – možná paradoxně – ideální pro chemické reakce. Ochlazování prachových zrn uvnitř těchto mračen z nich činí katalytické povrchy; plynné částice na nich ulpívají a následně spolu reagují, čímž vytvářejí nepřeberné množství těkavých biogenních molekul v podobě ledových vrstev, které rostou na povrchu prachových zrn.

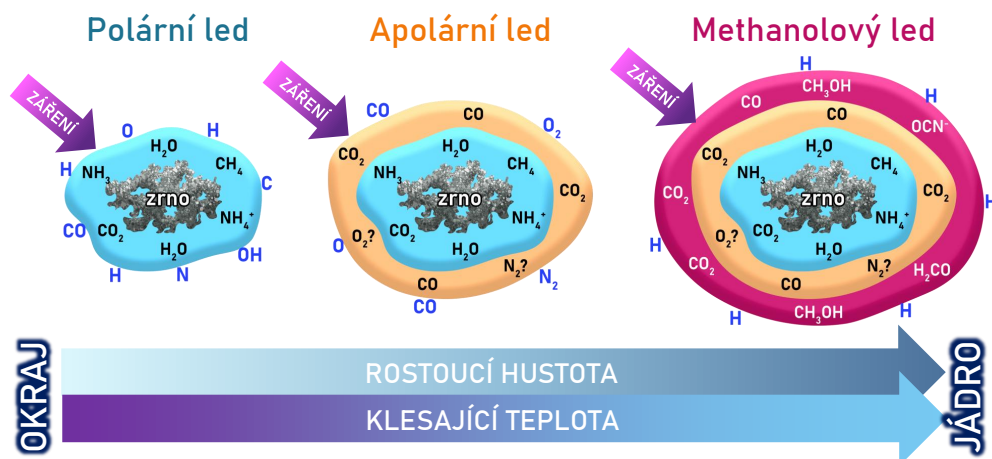
Nejhojnější z těchto molekul je voda, která vzniká v těchto temných a prašných podmínkách obzvláště účinně. V těchto ledech však lze nalézt i řadu dalších látek, jako je methanol, formaldehyd a amonné soli. Časem se prachové mračno může v důsledku vlastní gravitace zhroutit, což umožní, aby v jeho centru začala vznikat *protohvězda*. Ledové prachové částice z mračna – nyní obohacené o těkavé molekuly – následně sytí rostoucí hvězdu a okolní protoplanetární disk, ve kterém se formují její planety. Tímto způsobem se ledy vzniklé v mezihvězdných prachových mračnech stávají jednou z primárních složek planetárních systémů a slouží jako klíčový zdroj biogenních těkavých látek během formování planet.

Práce předložená v této disertaci zkoumá 1) chemii, která probíhá v mezihvězdných ledech během těchto nejranějších fází vývoje hvězd a planet, a 2) způsob, jakým tato chemie připravuje půdu pro vznik slunečních soustav, jako je ta naše, a pro distribuci těkavých látek v nich. K tomuto účelu využívá infračervenou (IR) spektroskopii v kombinovaném experimentálním a observačním přístupu, kdy jsou data získaná v pozemských laboratořích simulujících mezihvězdné podmínky využívána k analýze mezihvězdných spekter pozorovaných výkonnými IR zařízeními, jako je Vesmírný dalekohled *Jamese Webba* (JWST) a jeho předchůdci. Předkládané studie se zaměřují především na molekuly, které byly detekovány v primitivních malých tělesech sluneční soustavy bohatých na těkavé látky – zejména v kometách –, s cílem posoudit chemickou souvislost mezi mezihvězdným prostředím a planetárními systémy.

Chemie ledu během formování hvězd a planet

Chemické složení mezihvězdného prostředí (ISM) se skládá převážně z vodíku a určitého množství atomů helia vzniklých fúzí krátce po velkém třesku. Hmota vyvržená do vesmíru z explodujících hvězd navíc dodává stopová množství těžších prvků, jako je uhlík, dusík, kyslík, síra a křemík, a to ve formě atomů, iontů a mikroskopických zrn vysoce radiačně odolných molekul, jako jsou polycyklické aromatické uhlovodíky (PAH) a silikátové minerály.

Tato zrna odstiňují, absorbují a rozptylují mezihvězdné záření a katalyzují reakce na svém povrchu, čímž ochlazují své okolí a umožňují chemické reakce. V nejhustších oblastech mezihvězdných prachových mračen mohou teploty klesat až na 10 K (-263,15 °C). Při těchto teplotách tvoří plynné atomy a molekuly, které ulpívají na zrnech, vrstvy ledu. Vysoké zastoupení a mobilita atomů vodíku na povrchu těchto zrn vede k produkci redukovaných forem látek, jako jsou H_2O , CH_4 a NH_3 , přičemž voda je zdaleka nejhojnější. Látky kyselé povahy mohou reagovat se zásaditým NH_3 za vzniku amonných solí, jako jsou NH_4SH a NH_4OCN . Organické molekuly jako H_2CO a CH_3OH mohou vznikat také hydrogenací CO, který na zrna vymrzá z plynné fáze. Během vývoje mračna dominují chemii ledu v různých fázích a místech různé látky, což vede k chemické stratifikaci (vznik vrstev s rozdílným chemickým složením) v rámci ledových vrstev vytvořených během existence mračna (Obr. 2). Konkrétně ledové vrstvy bohaté na vodu vznikají převážně v raných, méně hustých fázích mračna, zatímco ledové vrstvy bohaté na CO a jeho produkty, jako je CH_3OH , vznikají v pozdějších, hustších fázích.

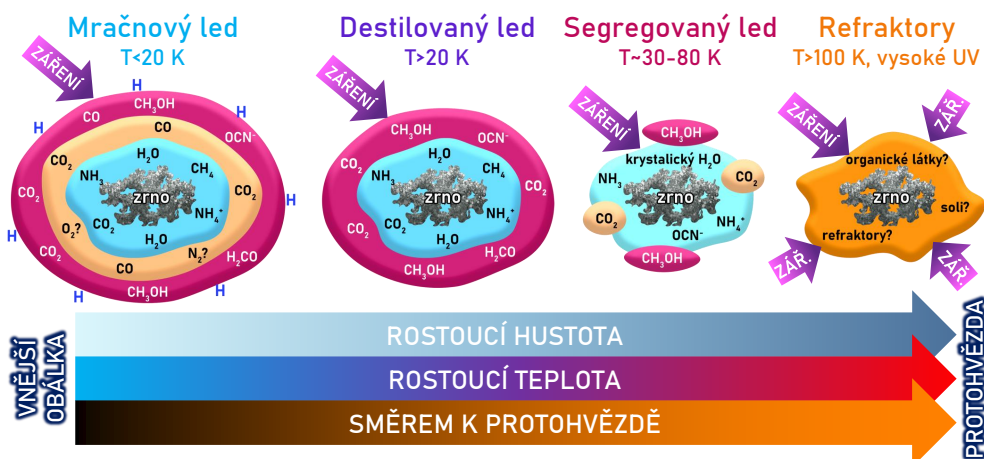


Obrázek 2: Různé fáze růstu ledu v molekulárních mračnecích. V prvních vrstvách ledu, které vznikají v méně hustých, translucentních (poloprůsvitných) oblastech blíže k okrajům mračna, se tvoří H_2O , CO_2 a hydrogenované sloučeniny jako NH_3 a CH_4 . S rostoucí hustotou klesají teploty, což umožňuje růst apolární vrstvy s převahou CO a CO_2 . V nejhustších oblastech dochází k účinné hydrogenaci CO za vzniku CH_3OH , což vede k vytvoření vrstvy bohaté na CH_3OH , která zahrnuje i další látky vzniklé z CO, jako jsou CO_2 , OCS a OCN^- .

Pokud je molekulární mračno dostatečně hmotné a husté, mohou gravitační nestability a turbulence vyvolat jeho gravitační kolaps, čímž započne tvorba protohvězdného jádra. Rodící

se protohvězda prochází evoluční sekvencí, která končí vznikem hvězdy a někdy i planet. Nejprve materiál z molekulárního mračka sytí centrální zdroj a gravitační potenciální energie se při kolapsu materiálu přeměňuje na energii tepelnou, která zahřívá okolní obálku materiálu. Jak protohvězda pokračuje v akreci okolního materiálu z obálky, zákon zachování momentu hybnosti vede k výtoku akreovaného materiálu z pólů zdroje a také ke zploštění vnitřní části obálky do *protoplanetárního disku*. Hmotu v disku se začíná shlukovat do větších těles, což značí počátky planetárního formování. Nakonec je materiál obálky zcela vyčerpán výtoky a akrecí, přičemž zůstává pouze disk a centrální hvězda před hlavní posloupností. Nakonec je i materiál disku vyčerpán větry z disku a akrecí centrálním zdrojem nebo planetesimálami v disku.

Ledy z fáze molekulárního mračka jsou zděděny protohvězdnou obálkou a diskem, kde se mohou transformovat prostřednictvím různých fyzikálních procesů (Obr. 3). Jedním z procesů, které jsou pro tuto transformaci nejpodstatnější, je desorpce ledových složek do plynné fáze, která se řídí molekulárními *sněžnými čarami* (snowlines): tepelnými hranicemi, které definují oblasti, kde jsou teploty v obálce nebo disku dostatečně vysoké na to, aby specifické druhy ledu sublimovaly.



Obrázek 3: Změny v chemii ledu během zpracování v protohvězdných obálkách a protoplanetárních discích. V nejchladnějších oblastech obálek a disků struktura ledu odpovídá strukturám pozorovaným v molekulárních mračcích. Jak se ledy přesouvají do teplejších oblastí, hyper-těkavé látky desorbují do plynné fáze, čímž dochází k destilaci ledu. Ještě vyšší teploty způsobují segregaci určitých látek v rámci ledové matrice a krystalizaci amorfních ledů. Předpokládá se, že po překročení 100 K většina těkavých ledů desorbovala do plynu, přičemž na zrna zůstaly odolnější (refraktorní) látky, jako jsou soli a větší komplexní organické molekuly.

V mladších a chladnějších protohvězdných obálkách, stejně jako v nejchladnějších, nejvzdálenějších oblastech vyvinutějších obálek a v chladných středových rovinách (midplanes) protoplanetárních disků, zůstávají ledy z molekulárních mraček z velké části nedotčeny. Jak se ledy přesouvají do teplejších oblastí, překračují molekulární sněžné čáry v pořadí podle klesající těkavosti, čímž dochází k efektivní *destilaci* ledových vrstev, jak různé složky desorbují do plynné fáze, kde mohou dále reagovat s jinými plynnými látkami. Předtím, než vyvolají

desorpci, zvyšují vyšší teploty také mobilitu látek uvnitř ledů, což vede k restrukturalizaci ledové matice. Zvýšená mobilita může navíc zvýšit rychlost reakcí zahrnujících těžší částice.

Sněžné čáry v protoplanetárních discích jsou klíčovým faktorem, který částečně určuje složení planetárních objektů na základě místa jejich vzniku v disku. Daná látka může být akreována planetesimály, které vznikají vně sněžné čáry této látky, takže výchozí materiál tvořící planetární těleso bude záviset na tom, kde se toto těleso nachází v protoplanetárním disku vzhledem k molekulárním sněžným čarám. Tento počáteční chemický záznam je následně pozměněn změnami sněžných čar během vývoje disku, dynamickým rozptylem planetárních objektů do různých oblastí disku a geologickými, atmosférickými procesy a procesy vesmírného zvětrávání, kterým planetární tělesa podléhají.

Má se za to, že malá tělesa bez atmosféry vznikla v nejvzdálenějších oblastech sluneční soustavy obsahují jedny z nejvíce původních záznamů o těkavých látkách zděděných z mezihvězdných ledů, protože jejich malá velikost vylučuje významné geologické nebo atmosférické zpracování a místo jejich vzniku v chladné vnější sluneční soustavě jim umožnilo uchovat si těkavé látky i po jejich zformování. Primárním příkladem jsou komety; srovnání jejich zásob těkavých látek se zásobami v mezihvězdných ledech a protohvězdných plynech odhalilo některé pozoruhodné podobnosti. Systematické rozdíly mezi kometárním a mezihvězdným chemickým složením však také poukazují na to, že kometární materiál prošel alespoň určitým stupněm chemického zpracování v rámci protoplanetárního disku.

Infračervená spektroskopie ledů

Molekuly absorbují nebo emitují světlo prostřednictvím přechodů mezi svými kvantovanými energetickými stavy. Molekuly ve vesmíru lze identifikovat a kvantifikovat pomocí jejich jedinečných emisních nebo absorpčních prvků v teleskopických spektrech. Chemie ledu popsaná v této práci je odhalována pomocí absorpčních prvků v infračervených (IR) vlnových délkách, které zkoumají vibrační energetické přechody.

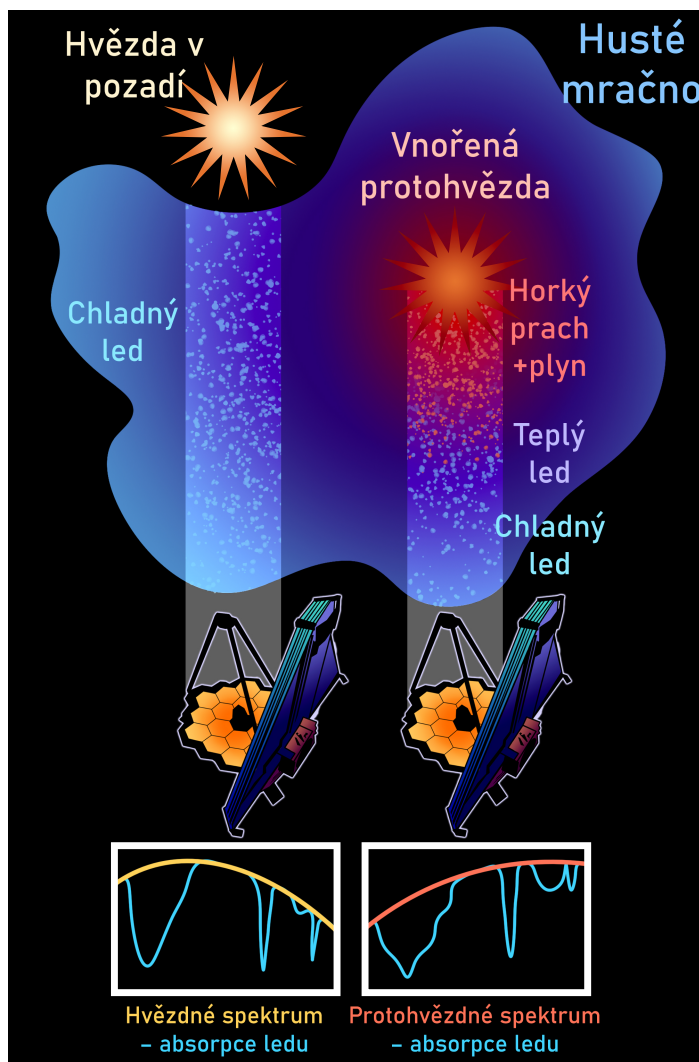
Pozice, tvary a intenzity IR absorpčních vrcholů (peaků) pozorovaných směrem k mezihvězdným oblastem obsahují informace o chemické identitě, množství a fyzikálním a chemickém prostředí mezihvězdných ledů. Získávání těchto informací vyžaduje integrovaný přístup, v němž jsou pozorování porovnávána s modely využívajícími laboratorní data.

Pozorovací metody

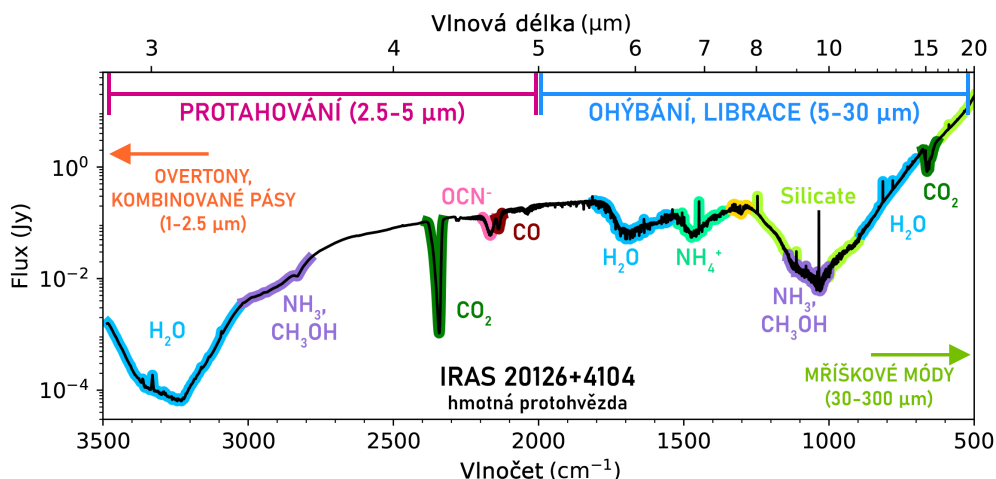
Obr. 4 poskytuje schéma pozorovací geometrie používané k získávání spekter mezihvězdného ledu. Dalekohled je zaměřen na zdroj IR záření, kterým může být buď hvězda v pozadí nacházející se za mezihvězdným mračnem, nebo protohvězda, která je v mračnu vnořena. Látky nacházející se podél zorné přímky od světelného zdroje k dalekohledu jsou pak pozorovány proti (proto)hvězdnému kontinuu (elektromagnetické záření). Velká část pozorovacích údajů použitých v této práci byla shromážděna pomocí JWST, který má ve srovnání s většinou předchozích IR dalekohledů vynikající citlivost, vlnový rozsah a spektrální i prostorové rozlišení. Příklad spektra mezihvězdných ledů pozorovaných pomocí JWST směrem k protohvězdě je uveden na Obr. 5.

Konkrétní molekulu lze v mezihvězdném IR spektru identifikovat nebo jí „přiřadit“ (assign), pokud jsou pozorovány její charakteristické IR rysy definované pomocí kontrolovaných

laboratorních experimentů nebo teoretických kvantových výpočtů. Přiřazení lze potvrdit porovnáním toho, jak těsně tvary vrcholů a vlnové délky odpovídají laboratorním datům. Po přiřazení lze IR vrchol použít ke kvantifikaci molekul podél zorné přímky. Kromě toho lze tvary vrcholů využít k odvození fyzikálních a chemických vlastností jejich ledových nosičů.



Obrázek 4: Schéma toho, jak dalekohledy pozorují absorpční rysy mezihvězdných ledů v hustých mračcích a protohvězdných obálkách. Ledy jsou pozorovány podél úzkého svazku (tzv. pencil beam), který sleduje dráhu od zdroje IR záření (buď zastíněné hvězdy v pozadí, nebo protohvězdy) k dalekohledu.



Obrázek 5: Příklad IR spektra masivní protohvězdy (IRAS 20126+4104) ukazující absorpční rysy mezihvězdného ledu a prachu na protohvězdném kontinuu.

Laboratorní metody

Laboratorní měření poskytují experimentální data, která jsou nezbytná pro interpretaci pozorování ledu. V takových experimentech jsou analogy mezihvězdného ledu nanášeny na kryogenně chlazený plochý substrát v ultravakuové komoře s typickými tlaky řádu $\leq 10^{-8}$ - 10^{-10} mbar (až bilionkrát nižšími než standardní atmosférický tlak na Zemi). Výsledný v laboratoři vypěstovaný led je fyzikální aproximací ledových vrstev na povrchu mezihvězdných prachových zrn. Následně jsou snímána laboratorní IR spektra těchto ledů, která lze v některých případech přímo porovnat s pozorováními ledu a identifikovat tak látky přítomné v ledech. Lze také vypočítat intenzity pásů (band strengths) ledových prvků, které lze použít ke kvantifikaci druhů ledu v pozorováních. Laboratorní práce prezentovaná v této disertaci byla provedena na zařízení Infrared Absorption Set-up for Ice Spectroscopy (IRASIS) v Leidenské laboratoři pro astrofyziku.

Přehled disertační práce

Infračervená spektroskopie opakovaně odhaluje, že mezihvězdné ledy jsou hostitelem bohaté chemie, která je základem pro vznik a transport těkavých látek v planetárních systémech. Nicméně v době zahájení této práce zůstávala řada otázek ohledně této chemie nezodpovězena: *Do jaké míry je mezihvězdný led zděděn a do jaké míry chemicky přepřacován v protohvězdných obálkách a protoplanetárních discích před jeho akrecí do planetárních objektů? Které látky jsou hlavními rezervoáry síry v nejhustších fázích formování hvězd? Které z mnoha komplexních organických molekul detekovaných v plynné fázi u protohvězd lze nalézt také v ledech a co nám to říká o historii jejich vzniku?* Kapitoly této práce se těmito otázkami zabývají.

Kapitola 2: Tato práce představuje první spolehlivou detekci vibračního módu natahování

vazby O-D v ledu HDO na vlnové délce $4,1\ \mu\text{m}$ pomocí dalekohledu JWST. Dále předkládá metodu pro kvantifikaci poměru ledu HDO/H₂O směrem k protohvězdám a používá tuto metodu ke zjištění tohoto poměru u dvou masivních protohvězd pozorovaných pomocí JWST. U těchto dvou zdrojů byly získány poměry ledu HDO/H₂O ve výši $4,6 \pm 1,8 \times 10^{-3}$ a $2,6 \pm 1,2 \times 10^{-3}$. Tyto poměry jsou podobné nejvyšším uváděným poměrům plynného HDO/H₂O naměřeným u masivních protohvězd a horkých vnitřních oblastí izolovaných protohvězd o nízké hmotnosti, což naznačuje, že alespoň některé poměry plynného HDO/H₂O naměřené v masivních horkých jádrech odpovídají poměrům v ledech.

Kapitola 3: Tato práce uvádí první detekci spektrálního rysu ledu HDO na $4,1\ \mu\text{m}$ pomocí JWST u sluneční protohvězdy nízké hmotnosti, L1527 IRS. Metoda vyvinutá v kapitole 2 je zde použita k měření poměru HDO/H₂O v ledu s hodnotou $4,4^{+3,7}_{-1,7} \times 10^{-3}$, což je podobné poměrům HDO/H₂O v plynu naměřeným v teplých vnitřních jádrech jiných obálek protohvězd nízké hmotnosti a protoplanetárních disků v obdobně izolovaných oblastech tvorby hvězd. Tato podobnost předběžně podporuje předpoklad, že vodní pára detekovaná v těchto oblastech není po sublimaci ledu významně měněna reakcemi v plynné fázi. Podporuje také hypotézu, že pre- a protohvězdný vodní led je do vnějších protoplanetárních disků z velké části zděděn v chemicky nezměněném stavu. Tento podíl je však přibližně 4-10krát vyšší než poměry HDO/H₂O v plynu naměřené u komet a protohvězd nízké hmotnosti v hustých hvězdokupách, což může být způsobeno přepracováním plynné vody v obálkách a discích nebo rozdíly mezi prehvězdnými podmínkami izolovaných jader a oblastmi s tvorbou hvězdokup, které jsou spíše podobné prostředí, v němž vzniklo naše Slunce.

Kapitola 4: Byla získána laboratorní IR spektra a intenzity pásů ledů obsahujících sůl NH₄SH za účelem výzkumu, zda by NH₄SH mohl být hlavním rezervoárem síry a nosičem pásu $6,85\ \mu\text{m}$ v mezihvězdných ledech. Laboratorní IR spektra byla porovnávána se spektry čtyř protohvězd a dvou hustých mračen. Pozorovaný rys na $6,85\ \mu\text{m}$ u těchto zdrojů dobře odpovídá laboratorním spektrům ledu NH₄SH:H₂O. Vypočtené sloupcové hustoty NH₄⁺ se pohybují v rozmezí 8–23 % vzhledem k H₂O. Síla pásu rysu SH⁻ je pravděpodobně příliš nízká na to, aby byl tento rys detekovatelný, ale kombinační mód NH₄SH na $5,3\ \mu\text{m}$ může představovat alternativní způsob detekce. Jeho předběžné přiřazení podporuje přítomnost solí NH₄⁺ v ledech a je prvním předběžným pozorováním aniontu SH⁻ v mezihvězdných ledech. Pokud je většina ($\gtrsim 80$ -85%) kationtů NH₄⁺ kvantifikovaných u zkoumaných zdrojů vázána na anionty SH⁻, pak by soli NH₄SH mohly tvořit až 17-18% jejich celkového rozpočtu síry.

Kapitola 5: Tato kapitola poskytuje knihovnu nových laboratorních IR spekter a intenzit pásů OCS v ledových směsích bohatých na CH₃OH a CO, z nichž některé obsahují také H₂S a H₂O. Cílem je podpořit budoucí studie o zastoupení, fyzikálně-chemickém prostředí a evoluční historii mezihvězdného ledu OCS. Z těchto nových laboratorních spekter poskytují nejlepší shodu s pozorováním masivních protohvězd terciární směsi ledu OCS:CO:CH₃OH, což přináší další důkaz, že OCS vzniká společně s CH₃OH, pravděpodobně chemickými cestami zahrnujícími CO. Popsána je také kalibrační metoda hmotnostní spektrometrie pro přípravu ledových směsí s využitím plynů a kapalin s vysokým tlakem par.

Kapitola 6: Plynný formamid byl detekován v mnoha mezihvězdných oblastech, ale otázka, zda vzniká v ledu nebo v plynu, je předmětem velkých debat. Tato kapitola charakterizuje IR

spektra a intenzity pásů čistého a smíšeného formamidu v analozích mezihvězdného ledu. Tři pásy formamidu jsou identifikovány jako potenciální indikátory (tracery) v observačních spektrech ledu. Laboratorní spektra jsou porovnána s pásem na $7,24\ \mu\text{m}$ ve spektrech protohvězd a prehvězdných jader. Pokud k pozorovanému pásu významně přispívá led formamidu, je pravděpodobnější, že se nachází v polární ledové matici; jiné druhy molekul však vykazují lepší shodu a je pravděpodobnější, že hlavními nosiči jsou ony. Byly vypočteny horní limity v rozmezí 0,35-5,1% vzhledem k H_2O , což je v souladu s hojností formamidu v plynné fázi u protohvězd i u komet.

Vědecký význam a budoucí směřování

- Led HDO je nyní díky JWST robustně detekovatelný v oblastech tvorby hvězd. Podobnosti mezi poměry D/H ve vodním ledu a plynu naměřenými u protohvězd a poměrem D/H v plynné vodě u protoplanetárních disků naznačují, že mezihvězdný led je děděn z protohvězdných obálek do protoplanetárních disků.
- Srovnání hodnot D/H ve vodě mezi protohvězdnými ledy a kometárními komami naznačuje buď určitou míru přepracování plynné vody v protoplanetárním disku, *nebo* diverzitu hodnot D/H v prehvězdném vodním ledu napříč různými oblastmi tvorby hvězd v naší galaxii, která je řízena okolním prostředím.
- Až $\sim 20\%$ síry v hustých oblastech tvorby hvězd, jako jsou molekulární mračna a protohvězdné obálky, může být vázáno v solích typu NH_4SH . To potenciálně řeší desítky let trvající záhadu, proč není v mezihvězdných ledech detekován H_2S , přestože to chemické modely předpovídají.
- Vzhledem k jejich vyšším desorpčním teplotám v porovnání s jejich neutrálními aciodobazickými protějšky mohly soli jako NH_4SH usnadnit transport těžkých prvků N a S do vnitřní sluneční soustavy, kde mohly být nakonec akreovány tělesy bohatými na těžké látky, jako jsou uhlíkaté asteroidy.
- Ani s JWST nemusí být možné jednoznačně detekovat absorpční rysy mnoha méně hojných a polorefrakturních komplexních organických molekul, jako je formamid, a to kvůli překryvům s absorpcemi hojnějších a těžavějších organických látek.

Do budoucna bude zapotřebí větší vzorek měření D/H ve vodním ledu u protohvězd v různých prostředích, aby bylo možné lépe vymezit poměr D/H ve vodním ledu, který zdělila naše sluneční soustava. Velká část mezihvězdné síry navíc stále zůstává pohřešována. Pokud se nachází v minerálech nebo alotropech, vyhlídky na přímou detekci takových látek nejsou slibné. Avšak bez ohledu na to, kde se tato chybějící síra nachází, nastal čas pro nový průzkum ledů obsahujících síru s využitím dat z JWST, který by aktualizoval předchozí poznatky. Laboratorní data prezentovaná v této práci takové průzkumy umožňují. A konečně, zaměření pozorování na zorné přímký s nízkým poměrem ledu k prachu, ale vysokými sloupci prachu (*tj.* protohvězdné obálky, které jsou stále husté, ale byly silně tepelně nebo energeticky zpracovány), může poskytnout lepší příležitosti pro identifikaci refrakturnějších stopových druhů ledu, jejichž absorpce jsou obvykle zastíněny silnými absorpcemi hojnějších těžavějších látek.