

## Nederlandse samenvatting:

# Chemische evolutie van kernen tot schijven

### Astrochemie: scheikunde in de ruimte

Chemie is overal. Auto's worden aangedreven door de chemische reactie tussen benzine en zuurstof. Planten en bomen zetten koolstofdioxide en water met behulp van zonlicht om in zuurstof en glucose. In ons eigen lichaam vindt het omgekeerde proces plaats om energie te leveren voor onze spieren. Zo zijn er nog talloze chemische reacties die de Aarde en het leven daarop maken wat ze zijn. De leus "chemie is overal" beperkt zich echter niet tot de Aarde. De rode kleur van Mars is bijvoorbeeld afkomstig van ijzeroxides, een groep chemische verbindingen bestaande uit ijzer- en zuurstofatomen. De verschillende kleuren in de atmosfeer van Jupiter worden veroorzaakt door allerlei stikstof-, zwavel- en fosforhoudende verbindingen. Zelfs in de schijnbaar lege ruimte tussen de planeten en de sterren blijkt zich een scala aan chemische verbindingen te bevinden.

De wetenschap die zich bezighoudt met deze verbindingen – met deze scheikunde in de ruimte – is de astrochemie. Zij is ontstaan in de jaren twintig van de vorige eeuw, toen langzaam maar zeker duidelijk werd dat de ruimte tussen de sterren niet geheel leeg is. Er bevindt zich een zeer ijl gas, ook wel het interstellair medium genoemd, dat op de meeste plaatsen een dichtheid heeft van minder dan één atoom per kubieke centimeter (cc). Ter vergelijking: een kubieke centimeter van de lucht om ons heen bevat ruim 10.000.000.000.000.000 (10 triljoen) atomen. Een klein deel van het interstellair medium – ongeveer 1% van het totale volume – bestaat uit zogeheten moleculaire wolken. Dit zijn gebieden met een dichtheid van ongeveer 100 atomen per cc. De toevoeging "moleculair" slaat op het feit dat bij deze dichtheid de atomen elkaar al vaak genoeg tegenkomen om chemische bindingen te vormen en zo moleculen te maken.

Het eerste molecuul in de ruimte werd pas in 1937 gevonden: CH, een combinatie van één atoom koolstof (C) en één atoom waterstof (H). Inmiddels zijn er zo'n 150 interstellair moleculen ontdekt, en ieder jaar komen er nog nieuwe bij. Op de lijst staan heel gewone verbindingen zoals H<sub>2</sub>O (water), CH<sub>4</sub> (methaan, het hoofdbestanddeel van aardgas) en CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH (ethanol, de bekendste vorm van alcohol), maar ook exotische moleculen zoals C<sub>6</sub>H<sup>-</sup> en HC<sub>11</sub>N. Een van de uitdagingen voor astrochemici is om te begrijpen hoe al deze stoffen in de ruimte worden gevormd, en waarom de ene stof in veel

hogere concentratie voorkomt dan de andere. In dit proefschrift zijn deze vragen vooral gericht op moleculen die we waarnemen in de omgeving rond pas gevormde sterren.

## De vorming van sterren en planeten

De moleculaire wolken uit de vorige paragraaf zijn tot enkele tientallen lichtjaren groot en hebben dus, ondanks hun enorm lage dichtheid, een aanzienlijke massa: 1000 à 10.000 keer de massa van de Zon.<sup>1,2</sup> Ze bevatten kleinere gebieden met hogere dichtheid. De dichtste hiervan worden kernen genoemd; zij zijn rond de 10.000 astronomische eenheden (AE) groot,<sup>3</sup> een paar zonsmassa's zwaar, en hebben een dichtheid van ongeveer een miljoen atomen of moleculen per cc. De wolk en de kernen bestaan voor 99 massa-% uit gas met een betrekkelijk eenvoudige chemische samenstelling (zie de paragraaf "Chemische evolutie"). Voor de rest bestaan ze uit stof: minuscule zandkorreltjes van ongeveer 0,1 micrometer (of 0,0001 millimeter), omgeven met een dun laagje ijs.

Sterren zoals de Zon ontstaan uit kernen. In figuur 1 is schematisch aangegeven hoe dit proces verloopt. Paneel a toont een moleculaire wolk met daarin een aantal kernen van hogere dichtheid, aangegeven met een donkerdere tint grijs. Paneel b zoomt in op één zo'n kern, met een typische afmeting van 10.000 AE. Voor het gemak doen we hier alsof de kern mooi bolvorming is, zodat we een cirkelvormige dwarsdoorsnede zien. In werkelijkheid zijn kernen echter zelden precies rond. Ongeacht de vorm verliest de kern op een gegeven moment haar stabiliteit en begint ze onder invloed van haar eigen zwaartekracht ineen te storten. Dit moment wordt beschouwd als het begin van het stervormingsproces.

Door het instorten wordt de dichtheid in het midden van de kern steeds hoger, zoals wederom aangegeven met de verschillende grijstinten. Na ongeveer 10.000 jaar<sup>4</sup> is de dichtheid zo hoog dat we kunnen spreken van een jonge ster (paneel c). De ronde vorm uit paneel b heeft nu plaatsgemaakt voor een plattere dichtheidsverdeling. Dit komt doordat de kern, net als de omringende moleculaire wolk, langzaam ronddraait. Een gevolg van deze draaiing is dat het materiaal dat van de buitenkant van de kern naar binnen valt, niet precies in het midden uitkomt. In plaats daarvan vormt het een platte schijf rond de jonge ster, meestal aangeduid als een circumstellaire schijf. Veel van het materiaal dat in de schijf terecht komt, beweegt verder naar binnen en valt uiteindelijk alsnog in de ster. Ondertussen wordt een deel van het materiaal weer uitgestoten in een sterke straalstroom, in een richting loodrecht op het vlak van de schijf. Deze straalstroom creëert een holle ruimte in het omringende materiaal, die we in paneel c zien als de witte zandlopervorm.

Na zo'n 100.000 jaar ( $10^5$  jr, paneel d) is de kern volledig ingestort. Wat overblijft is een jonge ster omringd door een circumstellaire schijf van ongeveer 100 AE groot. De

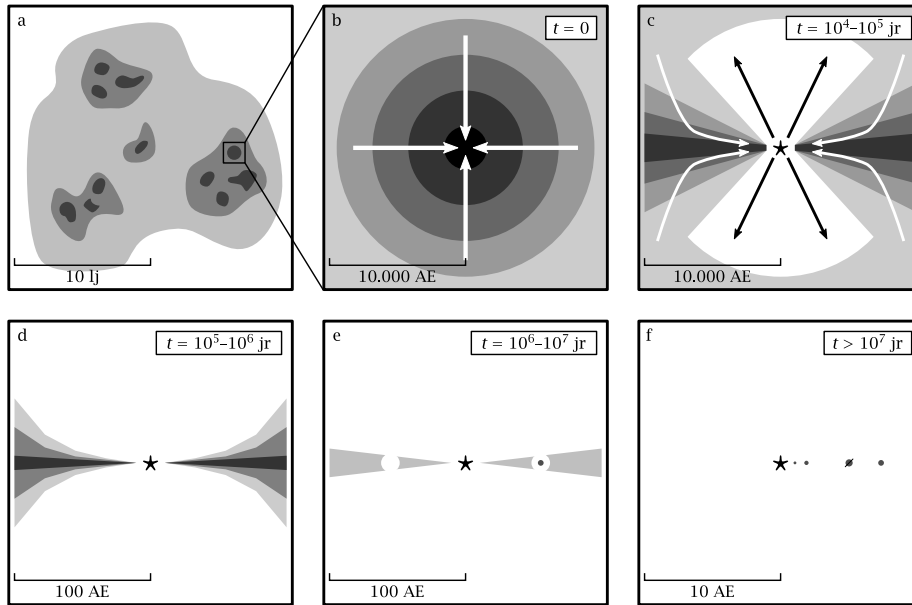
---

<sup>1</sup> Een lichtjaar is de afstand die het licht in een jaar aflegt. Licht reist met een snelheid van 300.000 km per seconde, dus een lichtjaar is 10.000.000.000.000 (10 biljoen) km. Na de Zon staat de dichtstbijzijnde ster, Proxima Centauri, op 4,2 keer deze afstand.

<sup>2</sup> De massa van de Zon is  $2 \times 10^{30}$  kg, oftewel een 2 met 30 nullen. De Zon is ruim 300.000 keer zo zwaar als de Aarde.

<sup>3</sup> Een astronomische eenheid is de gemiddelde afstand tussen de Zon en de Aarde, oftewel 150 miljoen km. Een afstand van 10.000 AE is gelijk aan 0,16 lichtjaar.

<sup>4</sup> In wetenschappelijke notatie is dit  $10^4$ : een 1 met vier nullen. Een miljoen is dus bijvoorbeeld  $10^6$ .



**Figuur 1** – Schematische weergave van de vorming van een ster met planeten. De tijd benodigd voor iedere fase is rechtsboven in de panelen aangegeven. Linksonder staan de ruimtelijke schalen; lj staat voor lichtjaar (10 biljoen km) en AE voor astronomische eenheid (150 miljoen km).

dichtheid van de schijf loopt op tot meer dan een biljoen moleculen per cc, een miljoen keer hoger dan de kern waaruit ze is ontstaan. De minuscule stofdeeltjes die in de kern aanwezig waren, beginnen zich nu te concentreren in het midden van de schijf. Ze botsen daar tegen elkaar aan en blijven soms plakken om steeds grotere stofdeeltjes te vormen. Zo krijgen we op een gegeven moment kiezels van een paar centimeter, die weer verder groeien tot rotsblokken van een paar meter, en nog verder tot planetaire embryo's van een paar kilometer. Ze zijn dan zo groot en zwaar dat hun zwaartekracht sterk genoeg is om het gas in de schijf als het ware op te zuigen. Zo belanden we na ongeveer een miljoen jaar in paneel e. De schijf is nu grotendeels verdwenen; wat er nog van over is bevat grote gaten waar het gas is opgenomen in de planeten-in-wording. Het proces van planeetgroei duurt nog enkele miljoenen jaren en resulteert tot slot in een volwassen zonnestelsel zoals getoond in paneel f.

## Chemische evolutie

De rode draad in dit proefschrift is de chemische samenstelling van het gas en het stof tijdens de verschillende fases in de vorming van een jonge ster. We bestuderen deze

samenstelling met behulp van astrochemische modellen. Zoals eerder opgemerkt is de chemische samenstelling van het gas in wolkenkernen relatief eenvoudig. Dat komt omdat ze een lage temperatuur hebben (10 Kelvin<sup>5</sup>) en nog niet blootstaan aan het sterke stralingsveld van een ster. De lage temperatuur leidt ertoe dat veel moleculen vastvriezen op de stofdeeltjes. Zodra de kern begint in te storten loopt de temperatuur op. De vluchtigste verbindingen in het ijs verdampen weer, en de algehele chemische samenstelling van het gas en het ijs verandert. Als even later de jonge ster begint te schijnen, zorgt het stralingsveld voor nog meer veranderingen. Dankzij al deze processen, die zijn samengevat in figuur 2, ziet de circumstellaire schijf er chemisch dus heel anders uit dan de kern waarmee we begonnen. Een belangrijke reden dat we zeer geïnteresseerd zijn in de chemie van de schijf, is dat het materiaal uit de schijf in en op de planeten terecht komt. Het is nog steeds onduidelijk waar de chemische bouwstenen voor het eerste leven op Aarde vandaan komen. Als we begrijpen in wat voor omgeving de Aarde is gevormd, en uit wat voor materiaal, kunnen we die vraag in de toekomst wellicht beantwoorden.

De meest directe manier om iets te weten te komen over de chemische samenstelling van moleculaire wolken en circumstellaire schijven, is door ze te bestuderen met een telescoop. Ieder molecuul, zowel op Aarde als in de ruimte, absorbeert licht en andere vormen van straling op een unieke manier. Door met telescopen te zoeken naar deze “streepjescodes” kunnen we vaststellen of een bepaalde stof wel of niet in een wolk of een schijf voorkomt. Deze methode heeft echter een aantal beperkingen. In de eerste plaats hebben we te maken met de enorme afstanden waarop stervormingsgebieden zich bevinden, waardoor we slechts weinig details kunnen onderscheiden. Een ander probleem is dat jonge sterren en schijven in het begin nog zijn ingebed in de moleculaire wolk (panelen b en c in figuur 1), zodat we ze niet rechtstreeks kunnen waarnemen. Tot slot vertellen waarnemingen ons alleen iets over de chemische samenstelling van een wolk of schijf op dit moment, en niet hoe de samenstelling vroeger was of in de toekomst zal zijn.

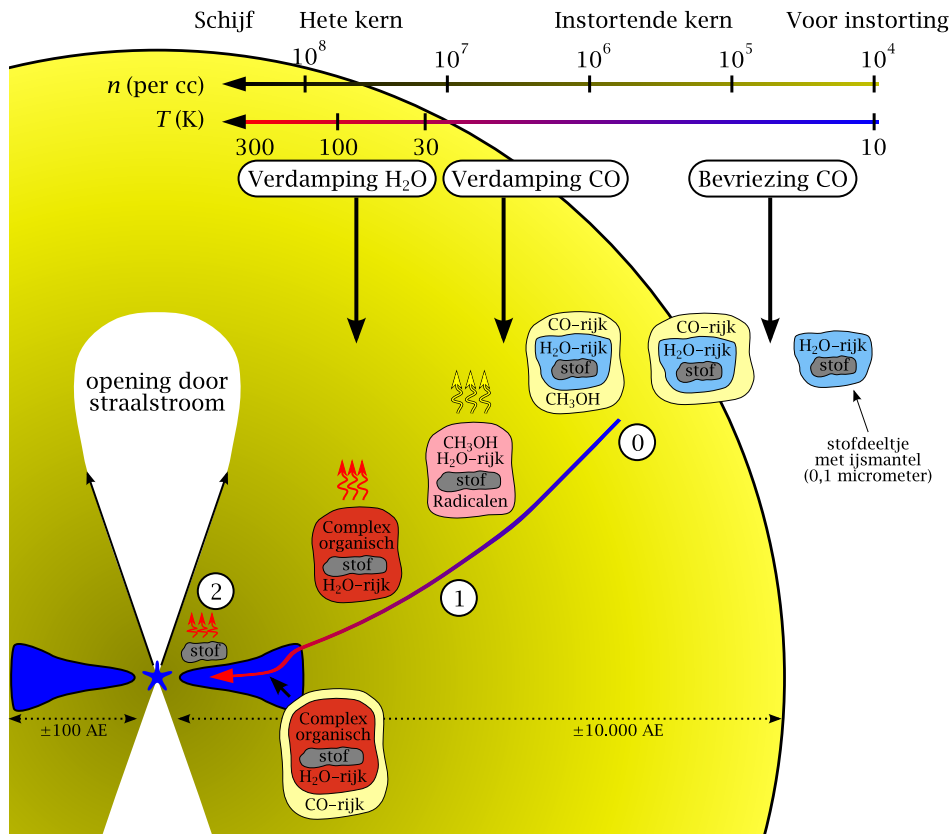
Een geschikte methode om de chemische evolutie in de tijd te volgen, en meteen ook om meer details te kunnen zien, is het gebruik van astrochemische modellen. Zo'n model bevat een aantal moleculen, die bepaalde reacties met elkaar aangaan. De snelheid van elke reactie hangt af van de fysische omstandigheden, zoals dichtheid, temperatuur en stralingsveld. Aan elk molecuul in het model wordt een beginconcentratie gegeven, die meestal berust op waargenomen concentraties. Vervolgens wordt een stelsel wiskundige vergelijkingen opgelost om te kijken hoe de concentraties van alle moleculen veranderen in de tijd. Dit kan gedaan worden voor constante of veranderende fysische condities. In het laatste geval kunnen we bijvoorbeeld kijken hoe de concentraties veranderen als een wolkenkern instort om een jonge ster en bijbehorende schijf te vormen.

## Dit proefschrift

Zoals gezegd staat in dit proefschrift de verandering van de chemische samenstelling tijdens het stervormingsproces centraal. In het verleden is hier door anderen al veel aan-

---

<sup>5</sup> Een temperatuur in Kelvin kan worden omgerekend in graden Celsius via  $T(^{\circ}\text{C}) = T(\text{K}) - 273$ . Een temperatuur van 10 K is dus  $-263$  °C.



**Figuur 2** – Schematische weergave van de chemische evolutie tijdens de vorming van een ster. Bovenin zijn de dichtheid ( $n$ , in atomen per cc) en temperatuur ( $T$ , in Kelvin) aangegeven; beide nemen toe van buiten naar binnen. De grijze bol stelt de instortende kern voor, met binnenin de jonge ster en de omringende schijf. De pijl (langs de punten 0, 1 en 2) is een mogelijke baan die het materiaal kan volgen vanuit de buitendelen van de kern naar de schijf. Langs deze baan is aangegeven hoe de samenstelling van de ijslaag rond de stofdeeltjes (niet op schaal) globaal verandert. Voor de kern begint in te storten is de temperatuur laag en vriezen stoffen als water ( $\text{H}_2\text{O}$ ) en koolstofmonoxide ( $\text{CO}$ ) vast op het stof. Het  $\text{CO}$  wordt deels omgezet in methanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ). Tijdens het instorten wordt het ijs opgewarmd. Het  $\text{CO}$  verdampt, maar het minder vluchtige water en methanol blijven bevroren. In het ijs worden radicalen (instabiele verbindingen) gevormd die snel verder reageren tot complexere organische moleculen zoals azijnzuur ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ) en ether ( $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ). De circumstellaire schijf is relatief koud, dus als het materiaal daarin terechtkomt kan  $\text{CO}$  weer bevriezen. Dichtbij de ster is de temperatuur zo hoog dat al het ijs verdampt.

dacht aan besteed. Dit is echter altijd met eindimensionale modellen gedaan. Daarmee kan prima de chemische evolutie in de instortende kern worden gevolgd, maar voor een goede beschrijving van de circumstellaire schijf zijn tweedimensionale modellen nodig. Dit proefschrift bevat het eerste astrochemische model dat de gehele chemische evolutie vanaf de kern tot aan de schijf volgt in twee dimensies.

Na een algemene inleiding in hoofdstuk 1 geven we in hoofdstuk 2 een gedetailleerde beschrijving van het model. We gebruiken een zogeheten semi-analytische methode om de dichtheden in de kern en de schijf te berekenen, alsmede de snelheden waarmee het materiaal naar de ster toe valt. De dichtheden en snelheden komen goed overeen met wat anderen hebben berekend met een meer gedetailleerde numerieke methode. Het voordeel van onze semi-analytische methode is dat ze sneller is en dat we makkelijker het model kunnen herhalen voor bijvoorbeeld een kern met een andere massa of andere draaisnelheid. De temperatuur heeft een grote invloed op de chemische evolutie. Zij kan niet goed semi-analytisch worden berekend, dus gebruiken we hier een nauwkeurige numerieke methode.

Als een eerste voorbeeld voor de chemische evolutie volgen we de twee veel voorkomende moleculen water en koolstofmonoxide (CO). Door de lage temperatuur in de kern vriezen ze allebei vast op de stofdeeltjes voordat de instorting begint. Tijdens het instorten verdampt CO al snel omdat het een lage bindingsenergie heeft. In een later stadium kan het weer bevroren in de diepste delen van de schijf. Zij ontvangen geen directe straling van de ster en zijn dus erg koud. Water heeft een hogere bindingsenergie dan CO en verdampt pas als het binnen ongeveer 10 AE van de jonge ster komt.

In hoofdstuk 4 kijken we in meer detail naar de draaisnelheid waarmee materiaal vanuit de kern op de schijf terechtkomt. Het is al sinds de jaren tachtig bekend dat het neerkomende materiaal minder snel rond de ster draait dan het materiaal in de schijf. Hoofdstuk 2 bevat een beperkte oplossing voor dit probleem; hier leiden we een betere af, die vervolgens ook in hoofdstuk 3 gebruikt wordt. De nieuwe oplossing levert nieuwe inzichten in de kwestie van kristallijn stof in schijven. Het stof in moleculaire wolken is geheel of vrijwel geheel amorf, maar in schijven is het tot zo'n 30% kristallijn. De overgang van amorf naar kristallijn vereist een temperatuur die veel hoger is dan de temperatuur waarbij het kristallijne materiaal wordt waargenomen. Ons model laat zien dat stof dicht bij de ster op de schijf terecht kan komen, daar heet genoeg wordt om van amorf over te gaan in kristallijn, en vervolgens door de schijf heen weer van de ster af beweegt en zo in koudere gebieden belandt.

De chemie uit hoofdstuk 2 wordt in hoofdstuk 3 sterk uitgebreid tot een netwerk van ruim 400 moleculen en ruim 5200 reacties. We kijken nu niet alleen meer naar CO en water, maar naar een twintigtal belangrijke zuurstof-, koolstof- en stikstofhoudende verbindingen. Het blijkt dat de meeste veranderingen in hun concentraties het gevolg zijn van een klein aantal sleutelprocessen, zoals het verdampen van CO of de fotodissociatie van water. Deze sleutelprocessen zijn weer terug te voeren op veranderingen in bijvoorbeeld temperatuur of de intensiteit van het stralingsveld.

In hoofdstuk 3 en 4 besteden we speciale aandacht aan kometen. Dit zijn rotsblokken ter grootte van een paar tot enkele tientallen kilometers, die tijdens de vorming van het zonnestelsel niet verder zijn gegroeid tot planeten. Op grond van de modelresultaten uit

hoofdstuk 4 en waarnemingen gedaan door anderen, concluderen we dat kometen worden gevormd uit kleinere brokken met verschillende oorsprong. Een deel van deze brokken is nooit sterk verwarmd, zodat water altijd in ijsvorm is gebleven en de gehele chemische samenstelling vrijwel hetzelfde is als die van moleculaire wolken. Een ander deel is juist wel sterk verwarmd doordat het dichtbij de ster op de schijf terecht kwam. Daarna is het naar het koudere gebied getransporteerd waar kometen worden gevormd. In dit materiaal is al het water verdampt en later weer bevroren, en het heeft een chemische samenstelling die duidelijk verschilt van die van een moleculaire wolk.

Hoofdstuk 5 beperkt zich tot CO en zijn isotoopvarianten.<sup>6</sup> Onder invloed van ultraviolette straling (UV-straling) kan een molecuul CO uiteenvallen in de losse atomen C en O. We herzien een model uit 1988 met nieuwe laboratoriumdata om de snelheid van dit uiteenvallen te berekenen en om te kijken hoe de snelheid afhangt van de positie in bijvoorbeeld een moleculaire wolk of een circumstellaire schijf. De meest voorkomende isotoopvariant  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  blijkt in de meeste gevallen het langzaamst uiteen te vallen. Daardoor komen er relatief meer  $^{13}\text{C}$ -,  $^{17}\text{O}$ - en  $^{18}\text{O}$ -atomen vrij. Dit gebeurt in een dusdanige verhouding dat we de hoeveelheden  $^{17}\text{O}$  en  $^{18}\text{O}$  in meteorieten kunnen verklaren.

Het laatste hoofdstuk draait om de chemie van polycyclische aromatische koolwaterstoffen (PAK's) in circumstellaire schijven. PAK's zijn een groep grote, stabiele moleculen bestaande uit een kippengaasachtig skelet van koolstofatomen omringd door een enkele rand waterstofatomen. We berekenen onder andere waar in de schijf de PAK's elektrisch geladen zijn en waar ze worden vernietigd door de UV-straling van de jonge ster. We concluderen dat waargenomen straling van PAK's in schijven in ruwweg gelijke mate afkomstig is van neutrale en geladen PAK's. De PAK's kunnen bovendien niet kleiner zijn dan honderd koolstofatomen.

---

<sup>6</sup> Isotopen zijn verschillende atomen van hetzelfde element, maar met een afwijkende massa. Twee van nature voorkomende stabiele koolstofisotopen zijn  $^{12}\text{C}$  en  $^{13}\text{C}$ , met atoommassa's van respectievelijk 12 en 13. De drie natuurlijke zuurstofisotopen zijn  $^{16}\text{O}$ ,  $^{17}\text{O}$  en  $^{18}\text{O}$ .

