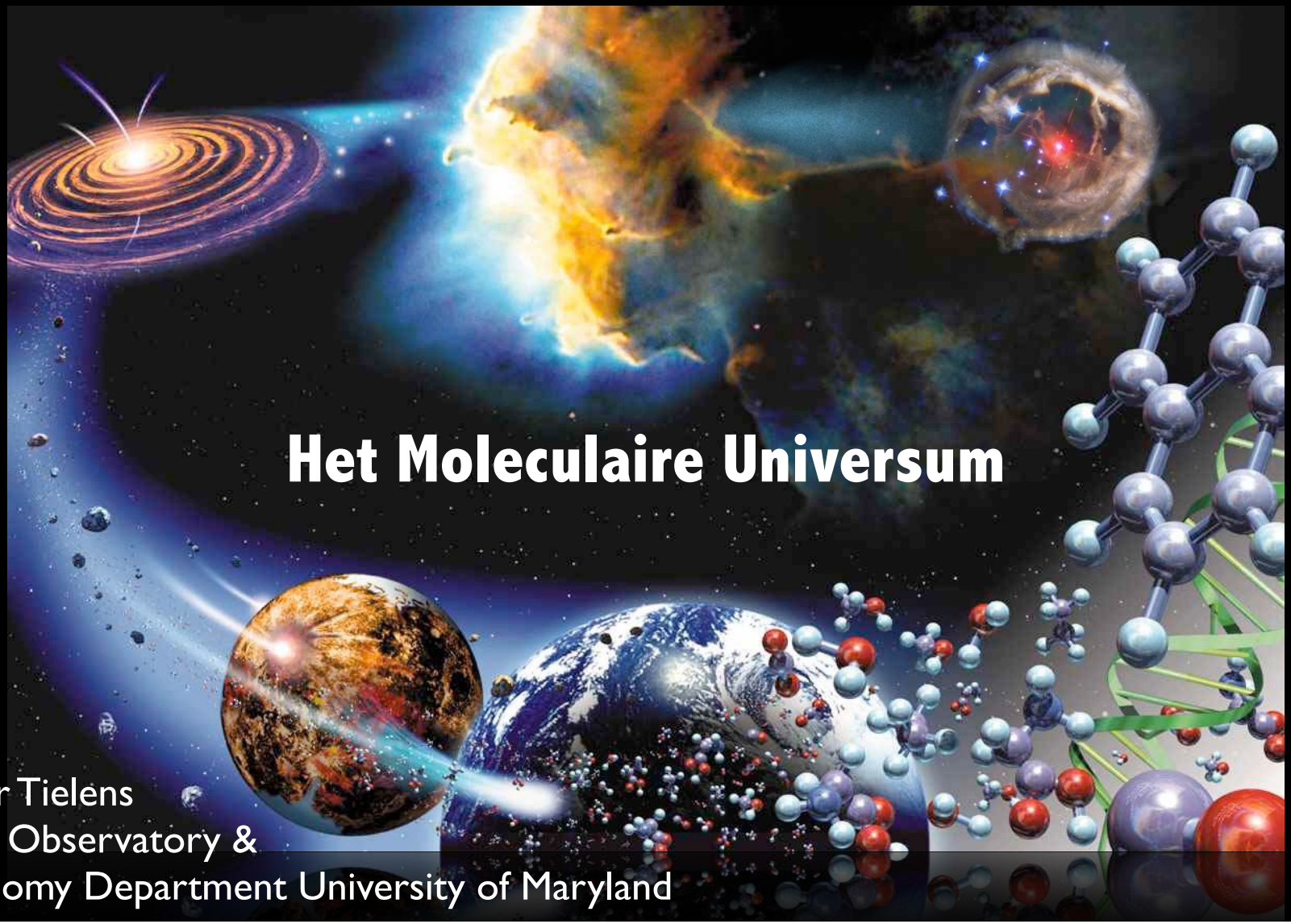
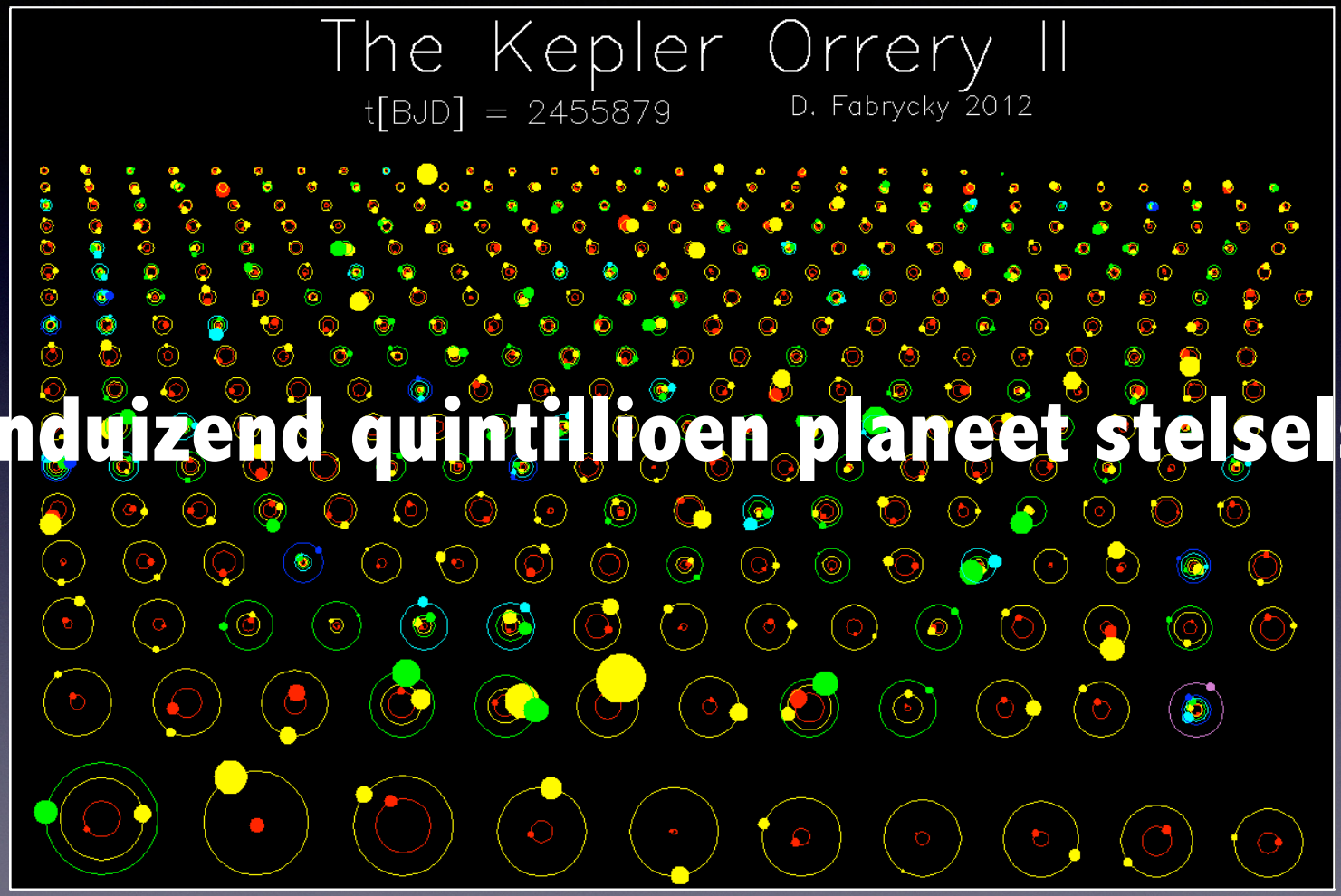


Xander Tielens
Leiden Observatory &
Astronomy Department University of Maryland

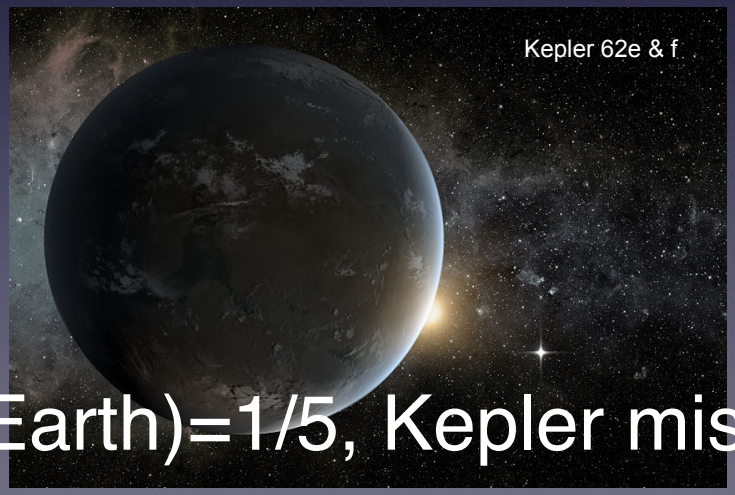


tienduizend quintillioen planeet stelsels !!

Op zoek naar Goudhaartje







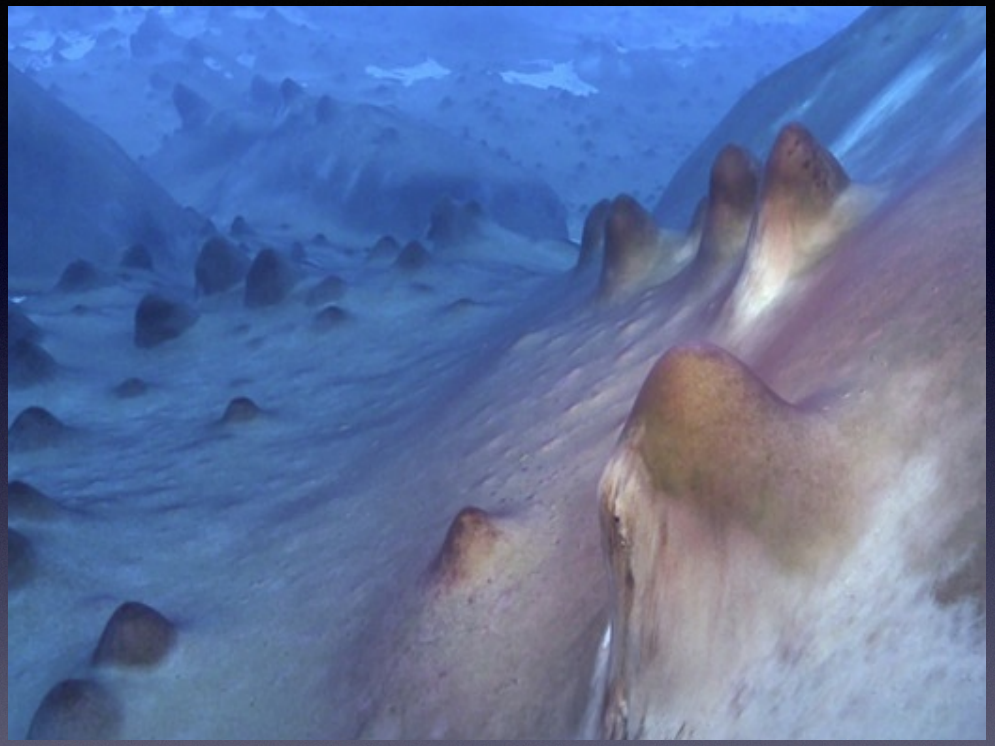
$\eta(\text{Earth})=1/5$, Kepler missie

Hel op Aarde



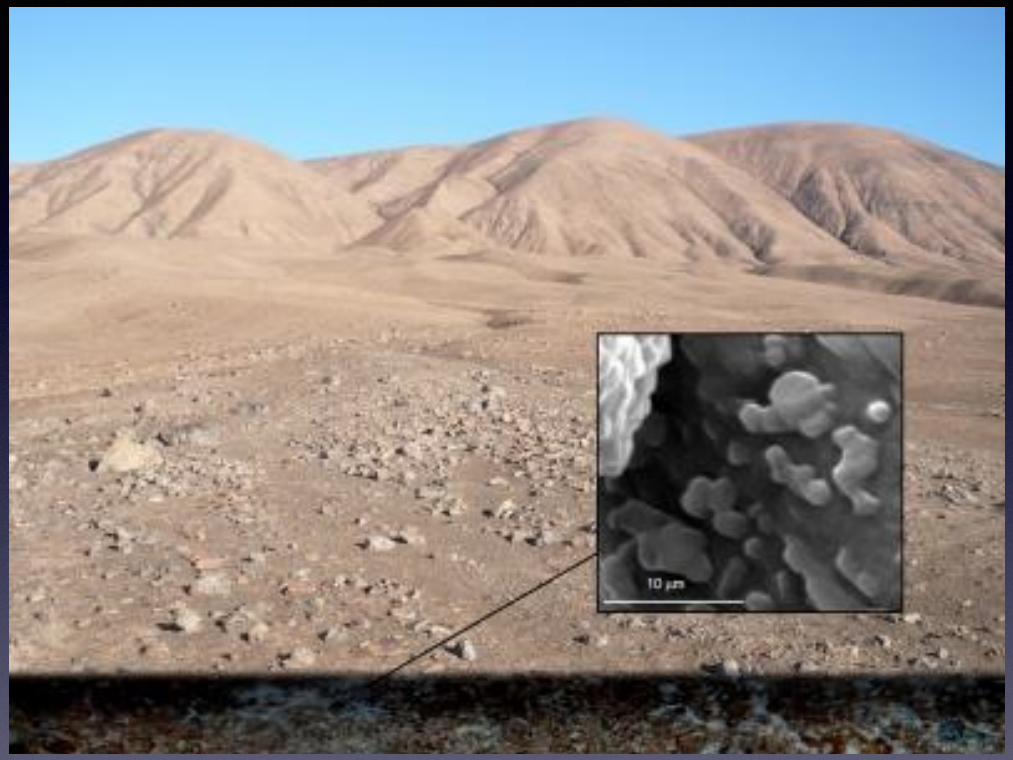
Cyano Bacteria in de Grand Prismatic Spring Yellowstone

Fossielen onder het IJs



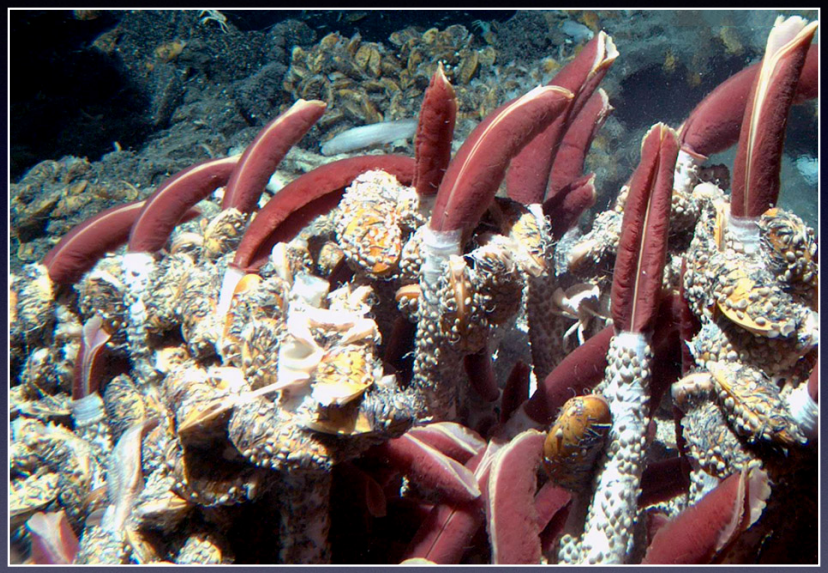
Bacterie koloniën in Antartica

Leven in de droogste plek op Aarde

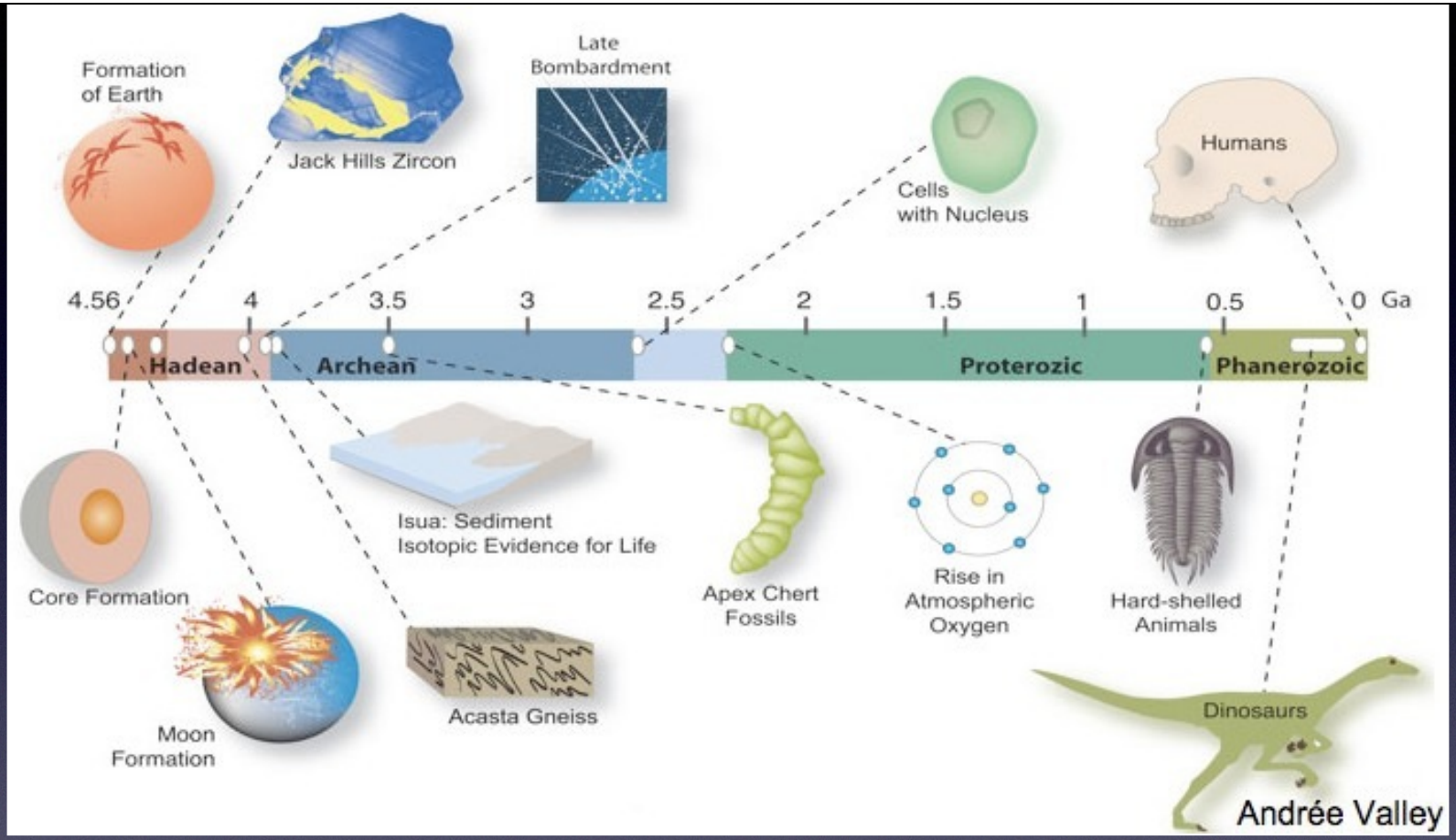


Microben die groeien op zout kristallen in de Atacama woestijn

Chemosynthetiche Bacteriën



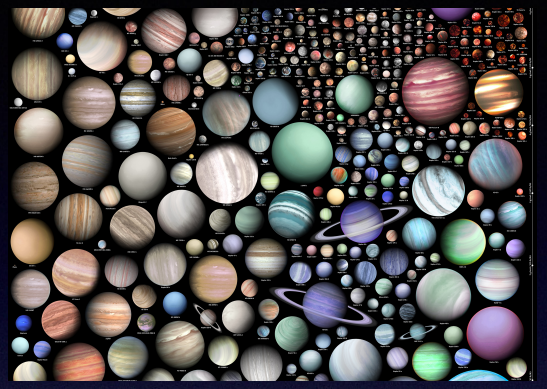
Tubewormen en mosselen bij een hydrothermische bron



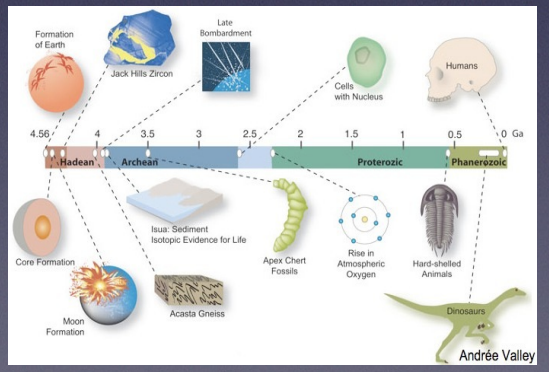
Leven ontwikkelde zich heel snel nadat de aarde en het zonnestelsel gevormd waren

Nieuw Paradigma

- Planeten zijn overal !
- Leven heeft alle ecologische niches op aarde “bevolkt” !
- Leven is welhaast onmiddelijk begonnen toen het mogelijk was !





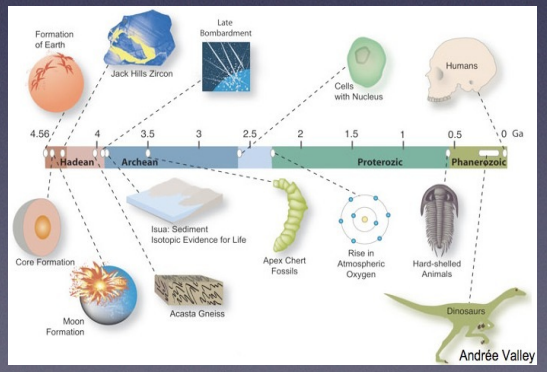


Nieuw Paradigma

Een “levend” universum !







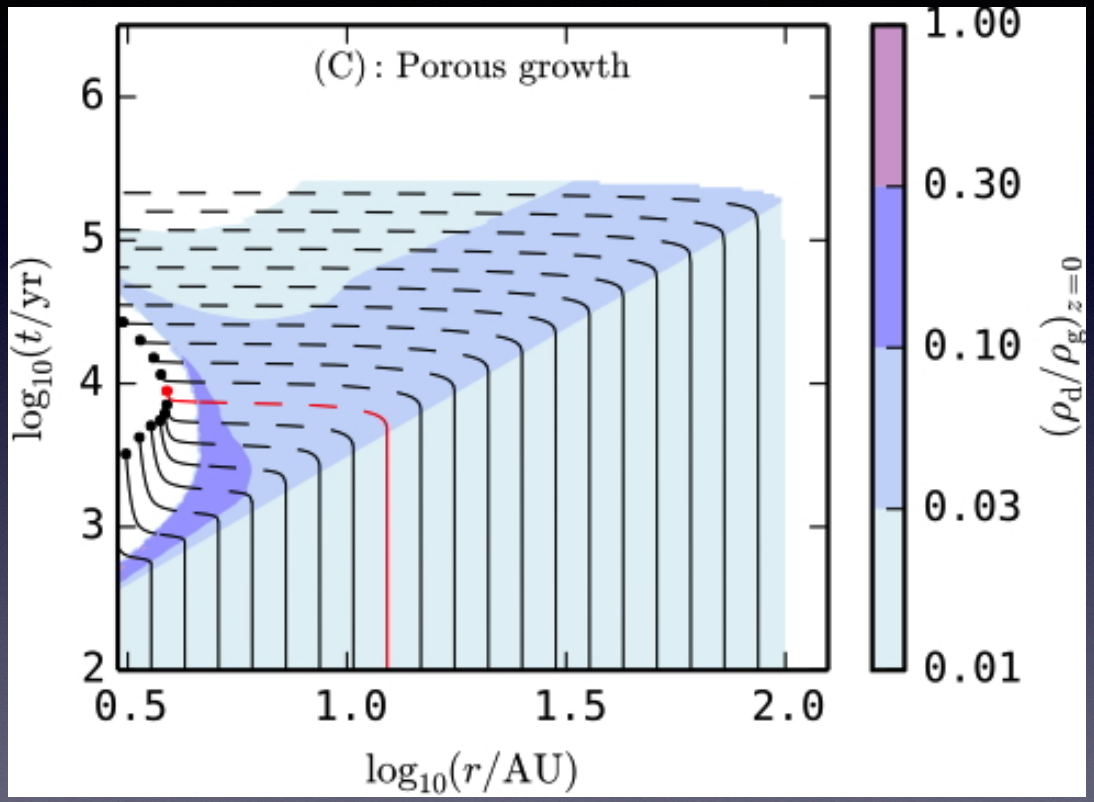

Hoe verkreeg de aarde
zijn organisch materiaal ?

Bouw je eigen zonnestelsel



Warm in het midden, ijskoud aan de buitenkant
en dit weerspiegelt zich in de chemische samenstelling

korrel voor korrel een planetesimaals maken



"kiezelstenen" uit de buitengebieden kunnen ijskoud materiaal toe voegen aan de binnenplaneten

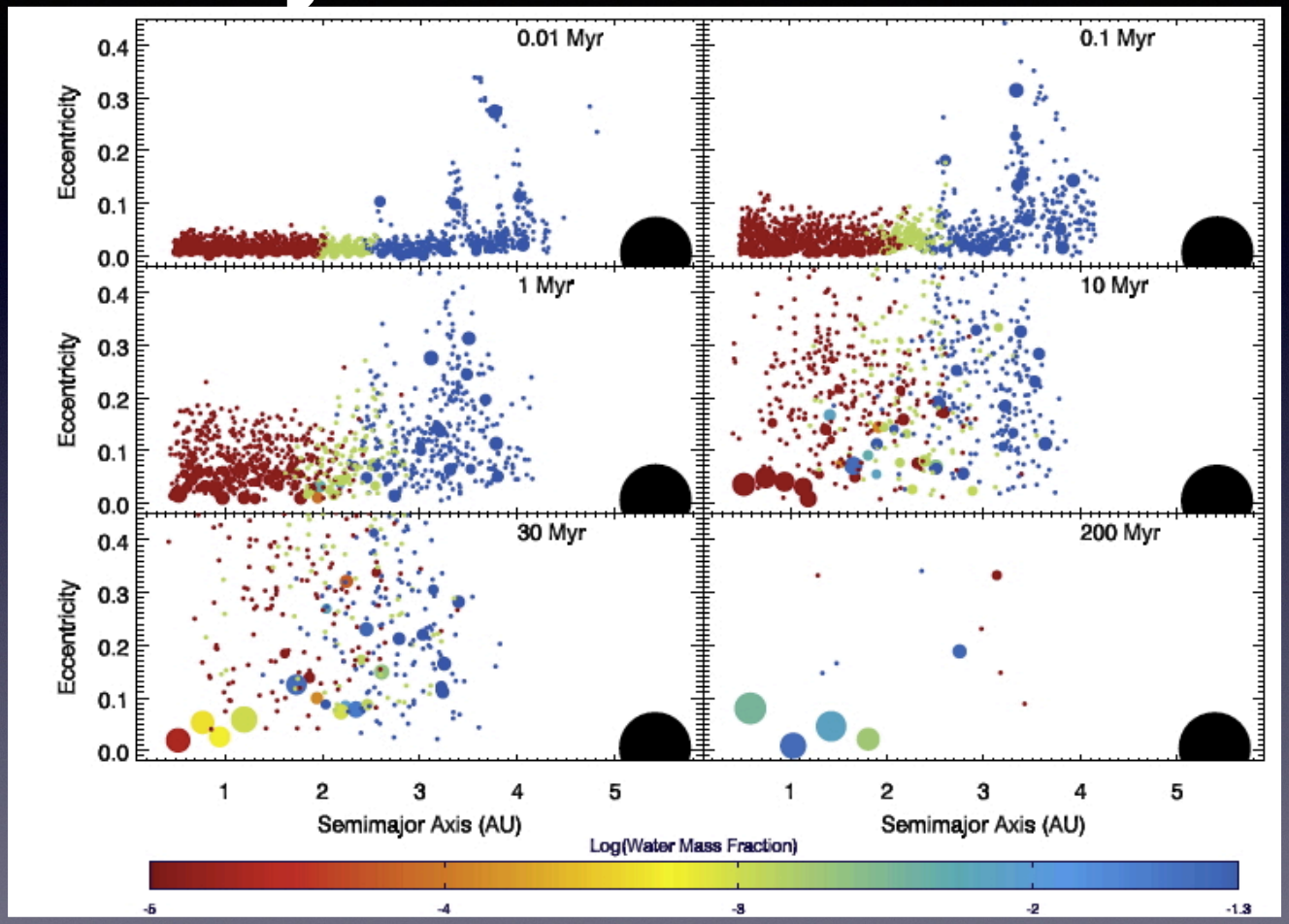
Krijt et al., 2016, A&A, 586,A20

Van Embryo tot Planeet

Samenstelling wordt aangegeven door kleur:

van puur steen (rood) tot 10% water en organisch materiaal (blauw)

De aarde betrekt zijn bouwstenen uit een gebied rijk aan "grondstoffen"



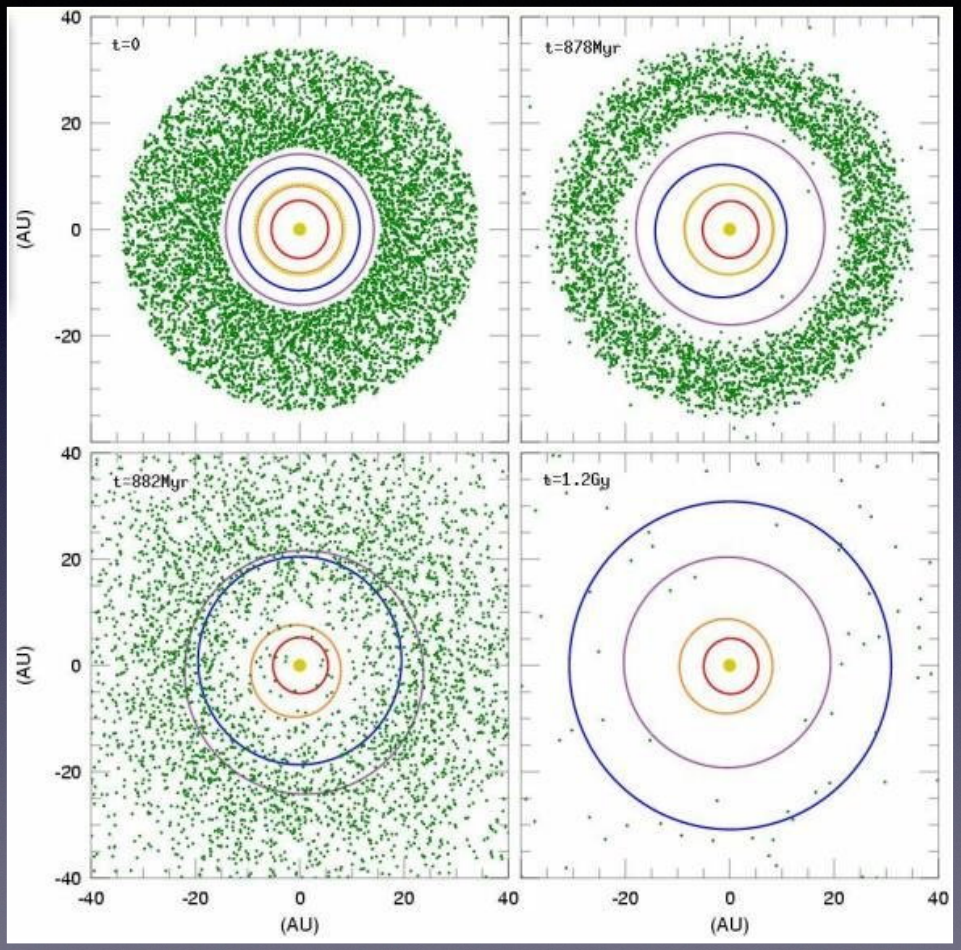
Petit et al, 2001, Icarus, 153, 338
Raymond et al, 2004, Icarus, 168, 1

Van Embryo tot Planeet

Samenstelling wordt aangegeven door kleur:

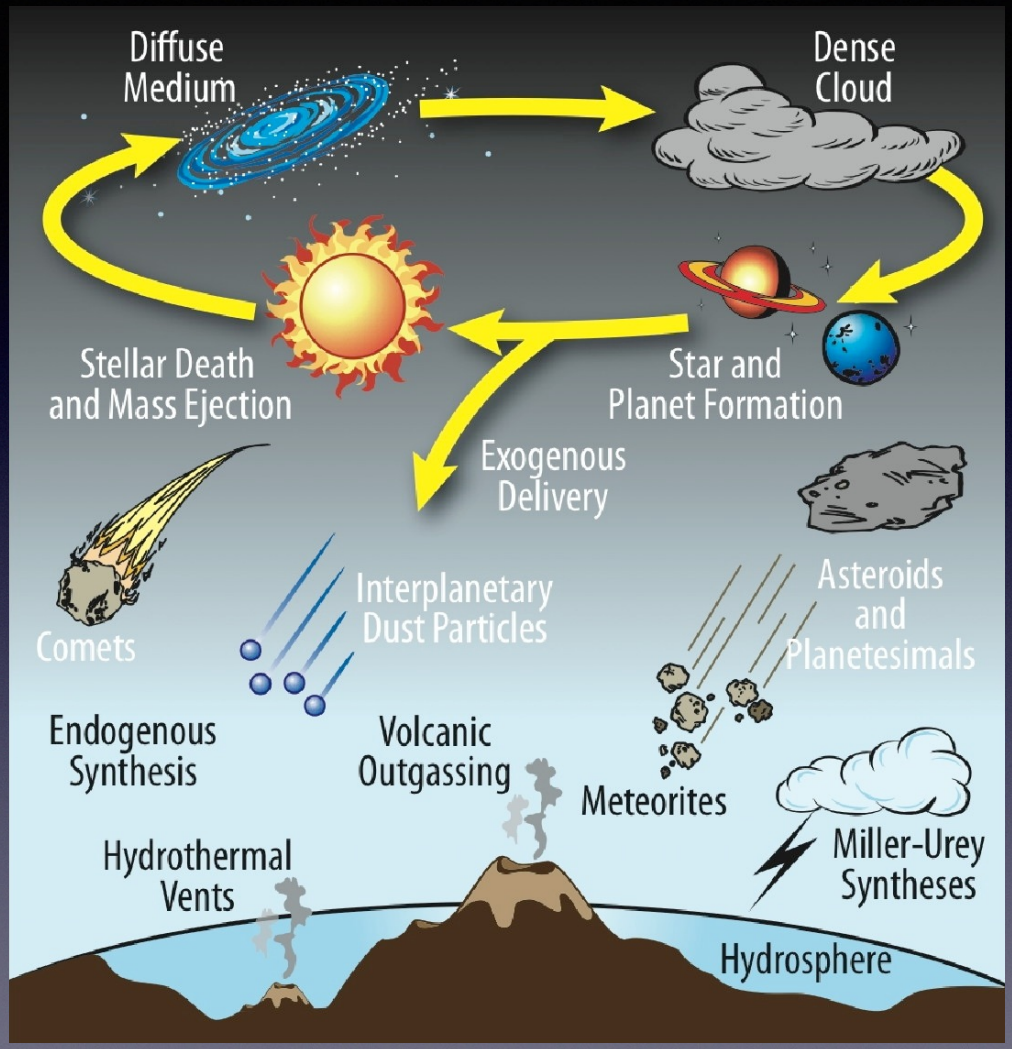
van puur steen (rood) tot 10% water en organisch materiaal (blauw)

De aarde betrekt zijn bouwstenen uit een gebied rijk aan "grondstoffen"



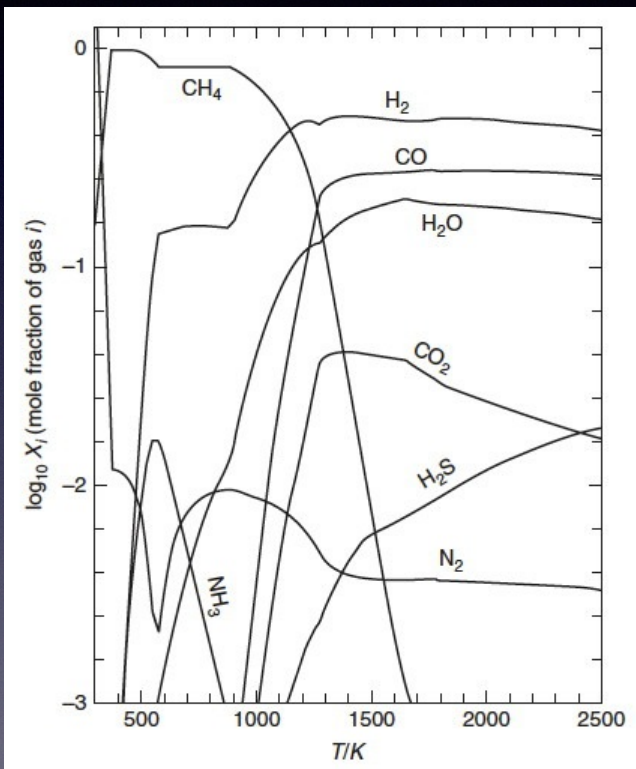
Petit et al, 2001, Icarus, 153, 338
Raymond et al, 2004, Icarus, 168, 1

Planeten betrekken water en organisch materiaal over het hele planeetstelsel



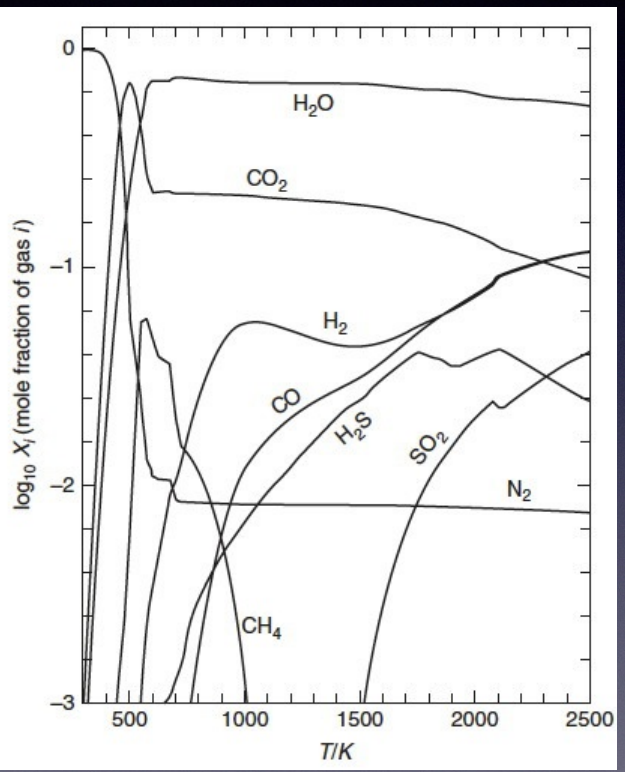
Erfgoed wordt bewaard !

“reducerende” begin samenstelling



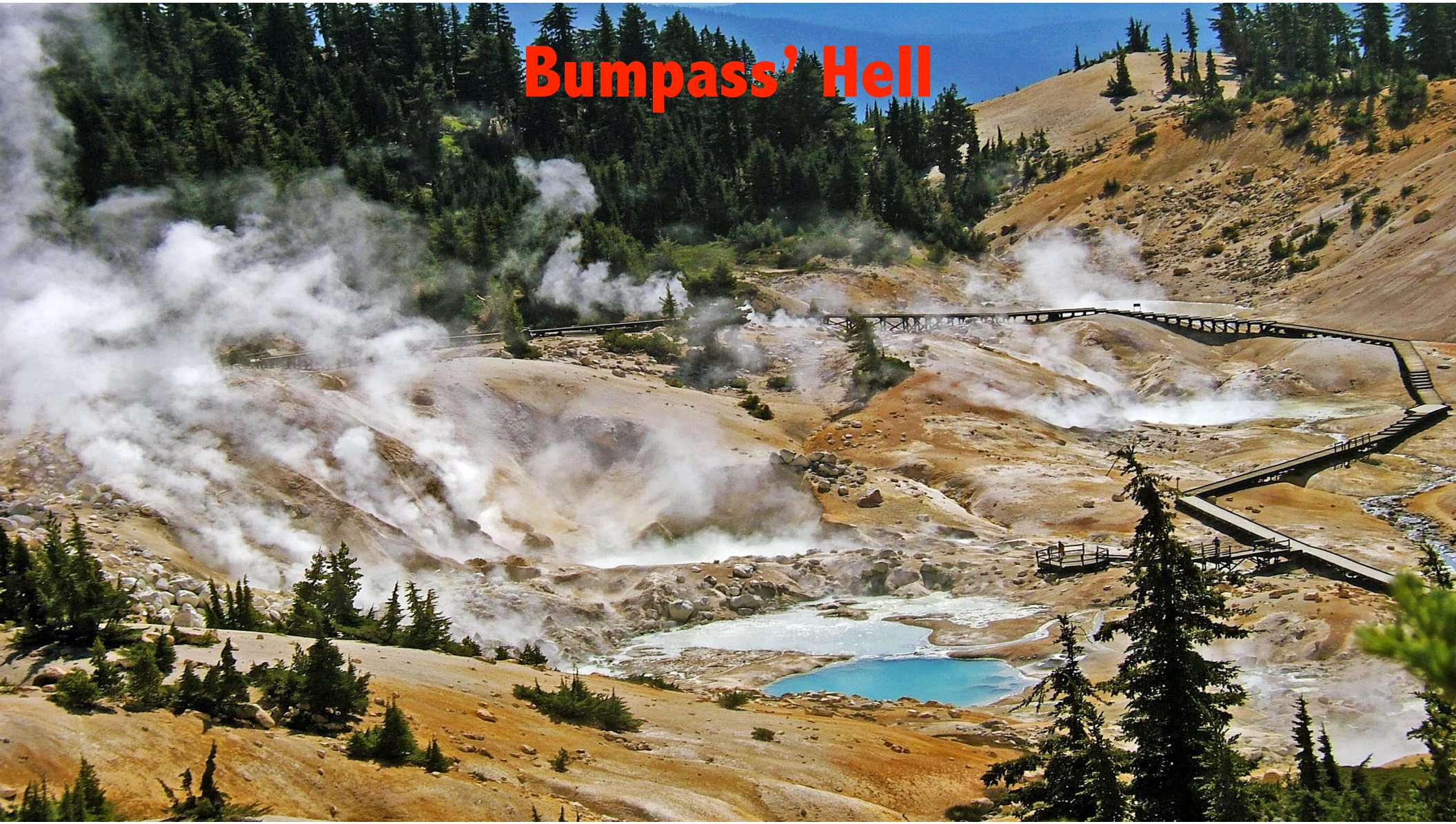
H chondrite

“oxiderende” begin samenstelling



CI chondrite

Schaefer & Fegley, 2007, Icarus, 186, 462


Bumpass' Hell

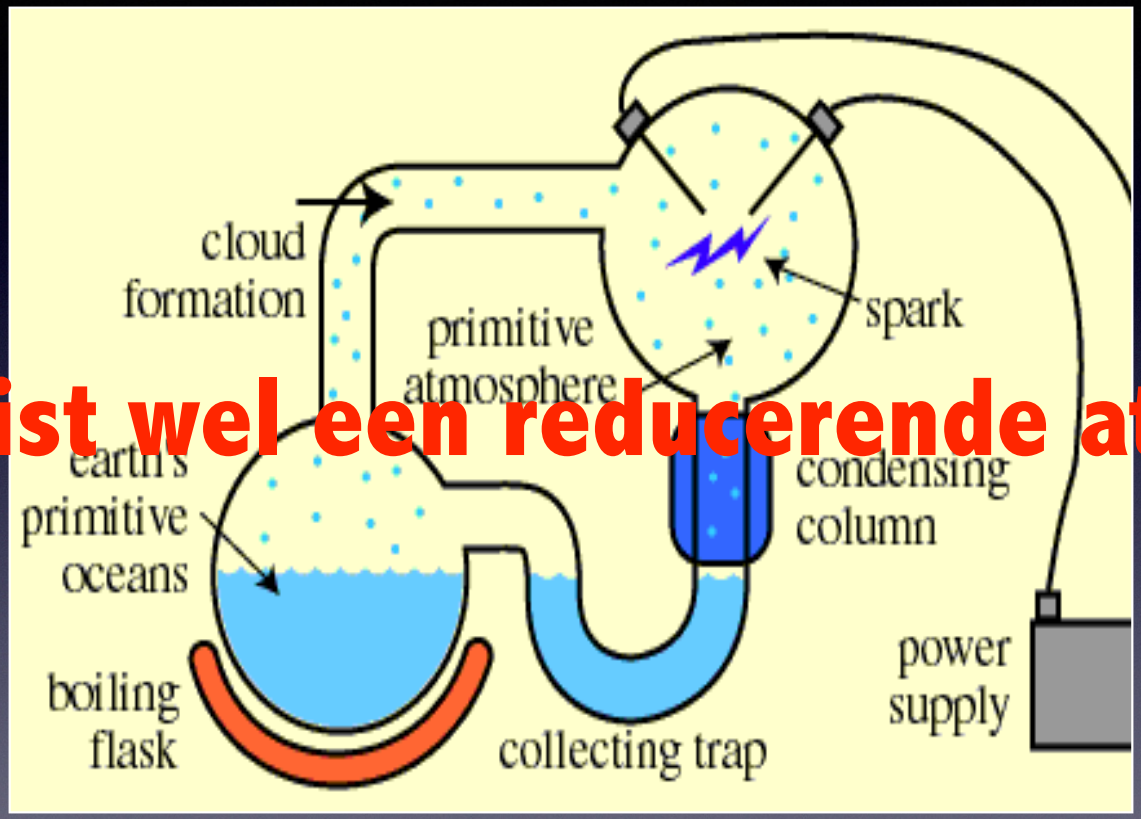
Darwin's kleine warme vijver



"But if (and oh what a big if) we could conceive in some warm little pond with all sorts of ammonia and phosphoric salts, light, heat, electricity etcetera present, that a protein compound was chemically formed, ready to undergo still more complex changes [..] "

~Charles Darwin, in a letter to Joseph Hooker (1871)

Darwin's warme vijver in het lab



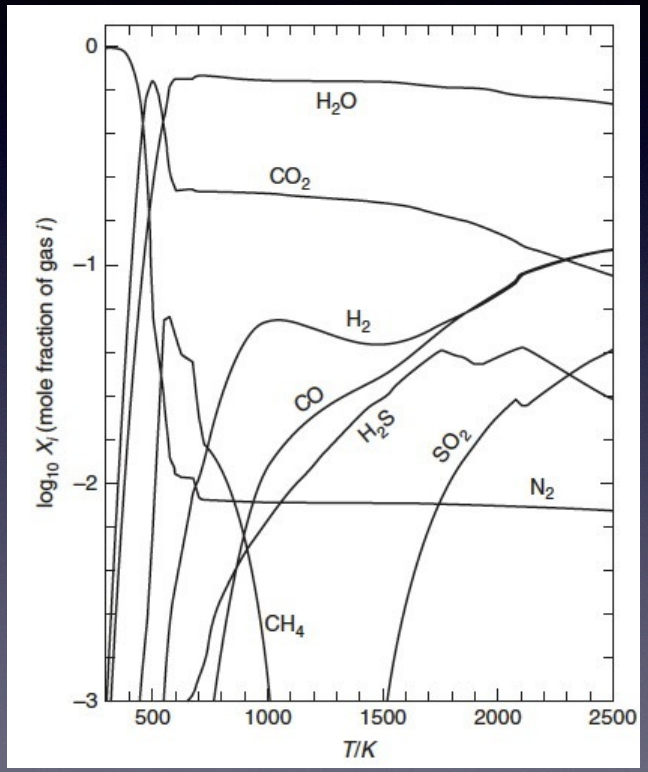
Dit vereist wel een reducerende atmosfeer

Urey-Miller experiment

Erfgoed wordt bewaard !

In een oxiderende atmosfeer moeten de bouwstenen van het leven binnengebracht worden

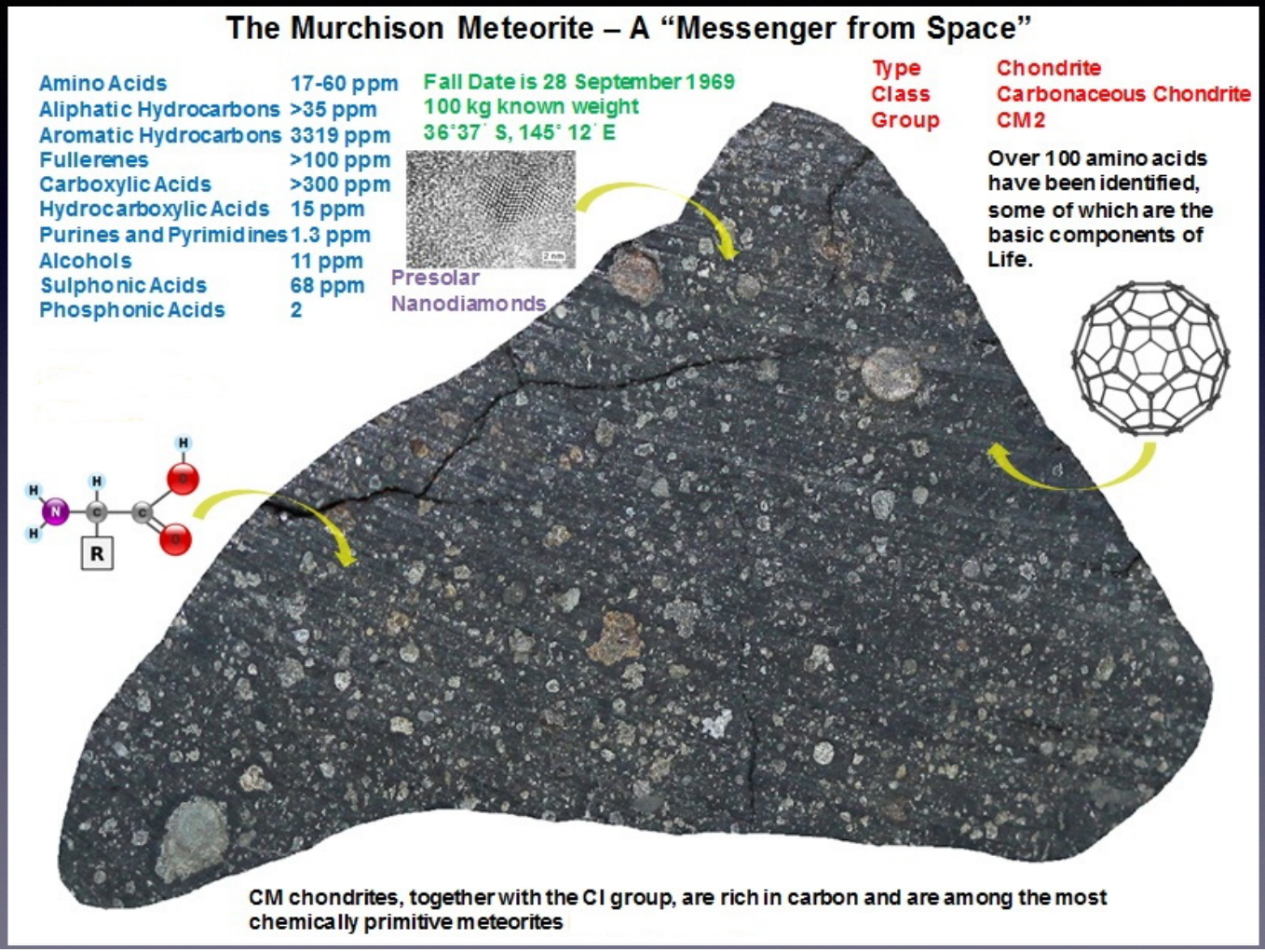
“oxiderende” begin samenstelling



CI chondrite

Schaefer & Fegley, 2007, Icarus, 186, 462

Buitenaardse Amino Zuren

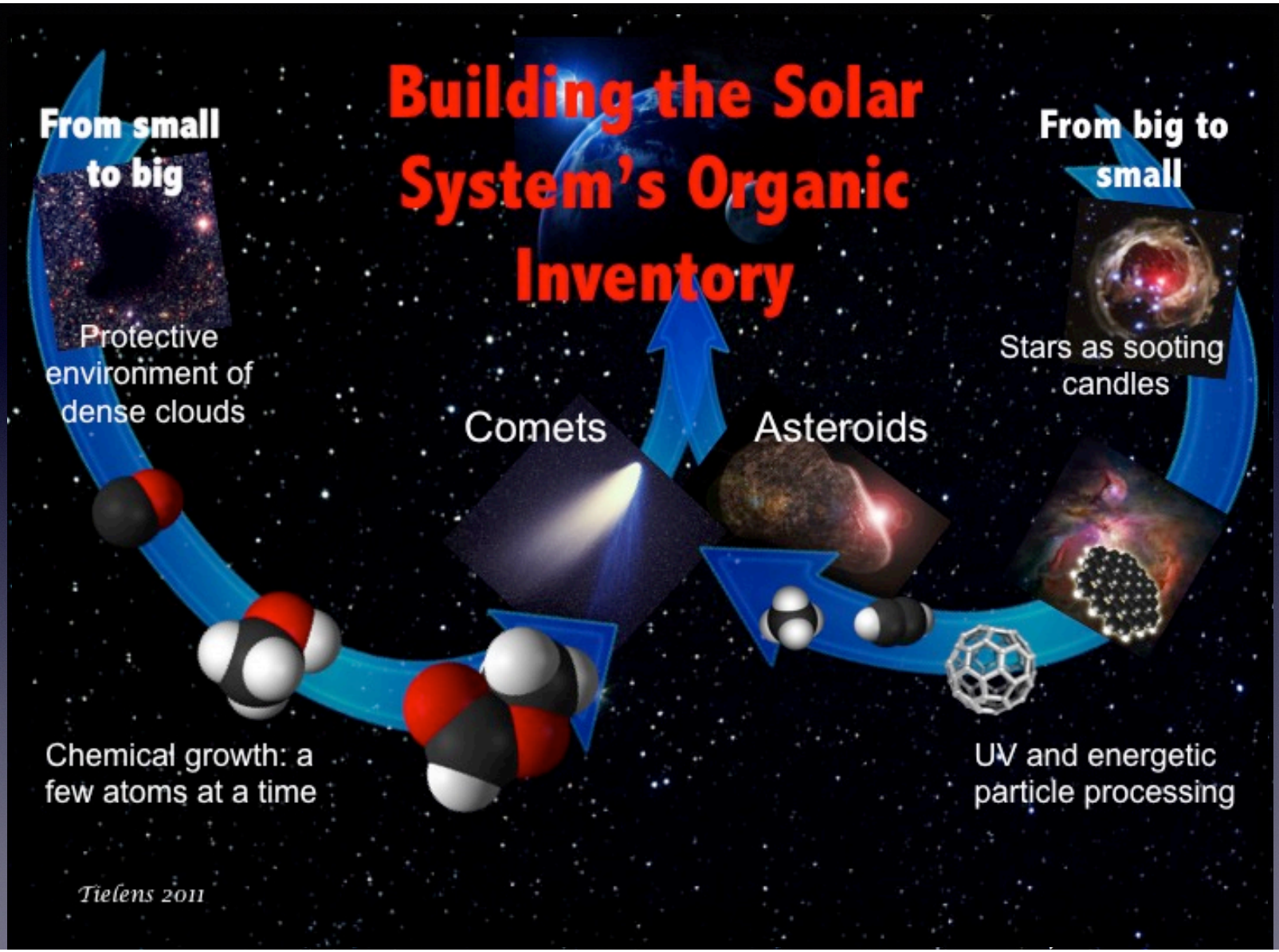


Moleculaire Astrophysica

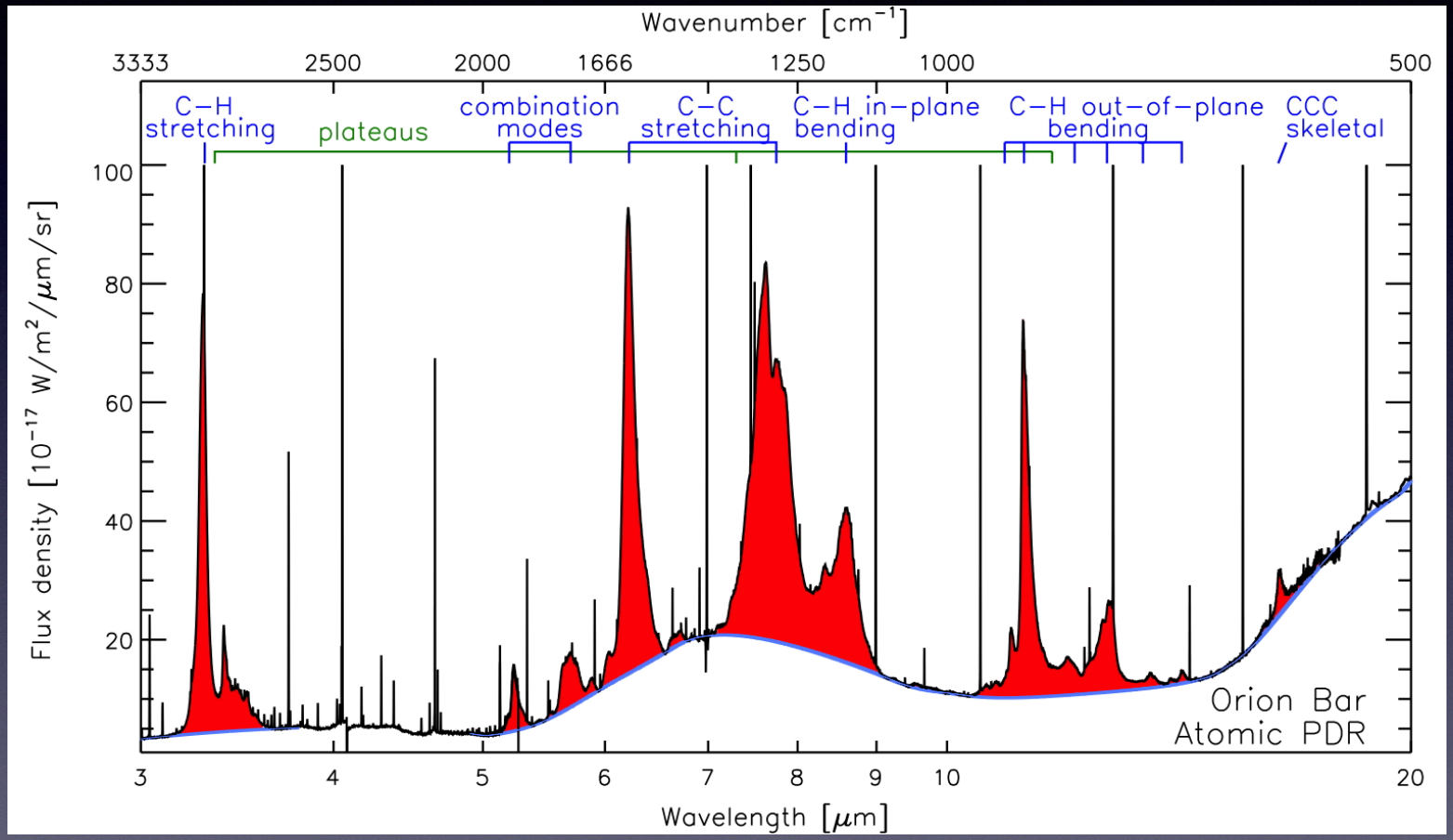
- Wat is het organische erfgoed in gebieden van ster en planeet vorming ? Was dat ook beschikbaar voor de Aarde en de andere planeten en manen in het zonnestelsel ?
- Wat voor rol spelen interstellaire moleculen in de evolutie van het Universum ?
- Hoe kunnen we moleculen gebruiken om het heelal te bestuderen ?

Moleculaire Astrophysica

- Wat is het organische erfgoed in gebieden van ster en planeet vorming ? Was dat ook beschikbaar voor de Aarde en de andere planeten en manen in het zonnestelsel ?
- Wat voor rol spelen interstellaire moleculen in de evolutie van het Universum ?
- Hoe kunnen we moleculen gebruiken om het heelal te bestuderen ?

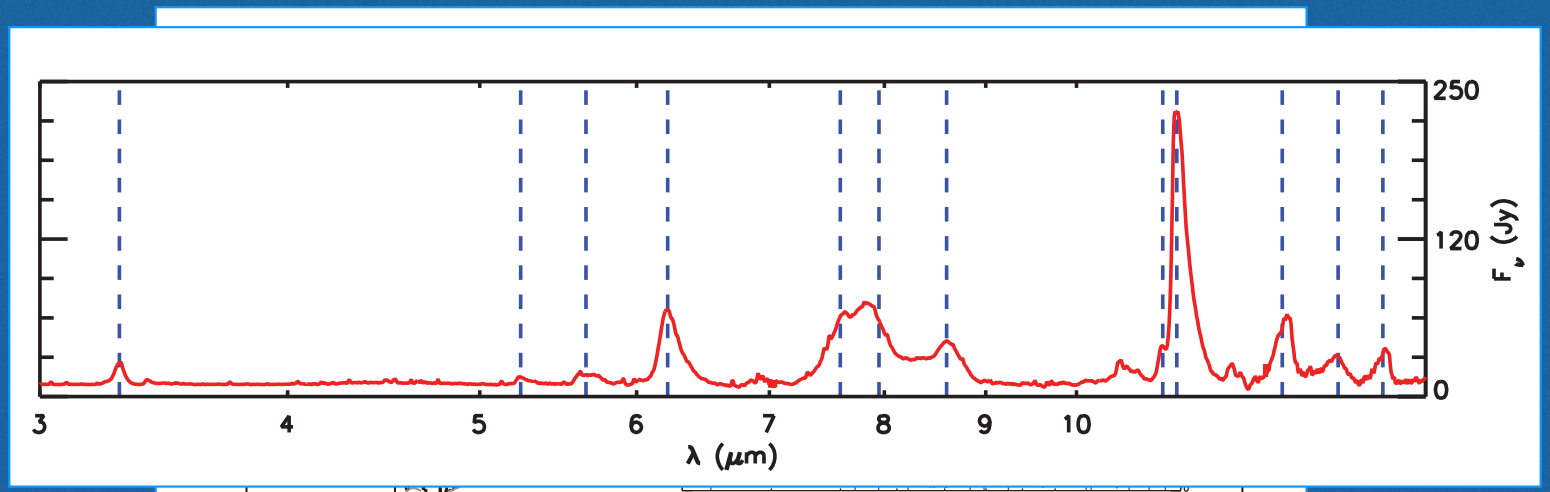

Building the Solar System's Organic Inventory
From small to big
Protective environment of dense clouds
From big to small
Stars as sooting candles
Comets
Asteroids
Chemical growth: a few atoms at a time
UV and energetic particle processing
Tielens 2011

Het ongelooflijk rijke, interstellaire PAK spectrum

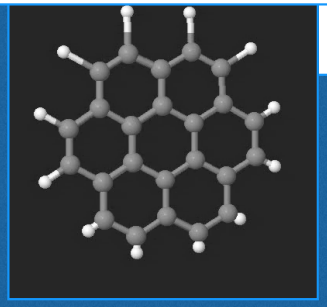


Peeters et al, 2002, A&A, 390, 1089
Chown et al, 2023, ApJ, in press

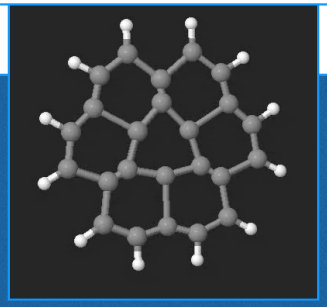
Het mid-infrarode spectrum van PAKs



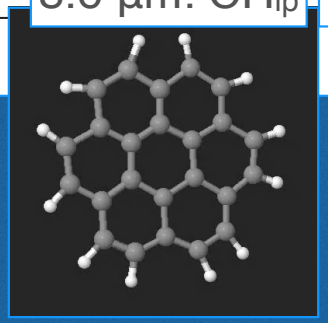
3.3 μm: $CH_{stretch}$



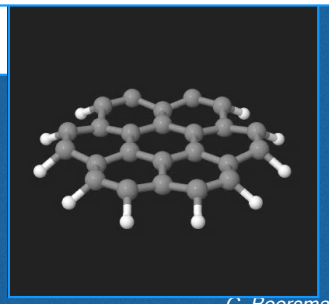
6.2 μm: $CC_{stretch}$



8.6 μm: CH_{ip}



10-15 μm: CH_{oop}



C. Boersma

Orion



PAKs in Orion



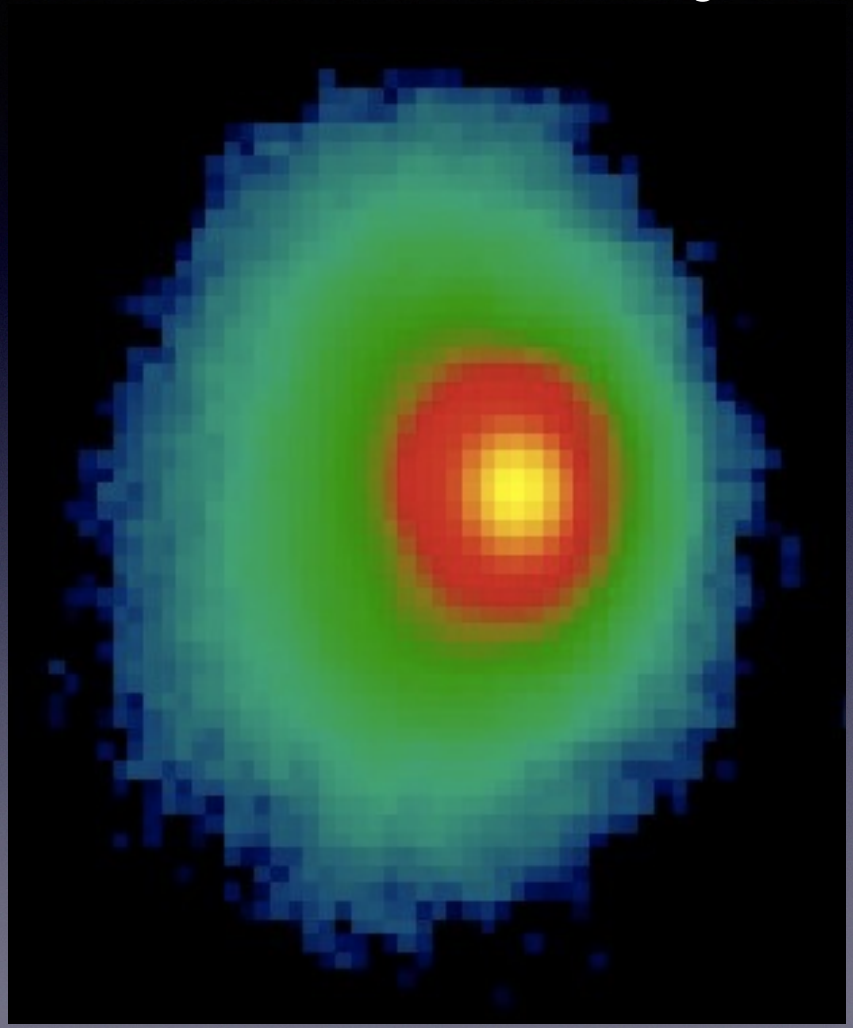


M51: The Whirlpool Galaxy



PAKs in M51: The Whirlpool Galaxy

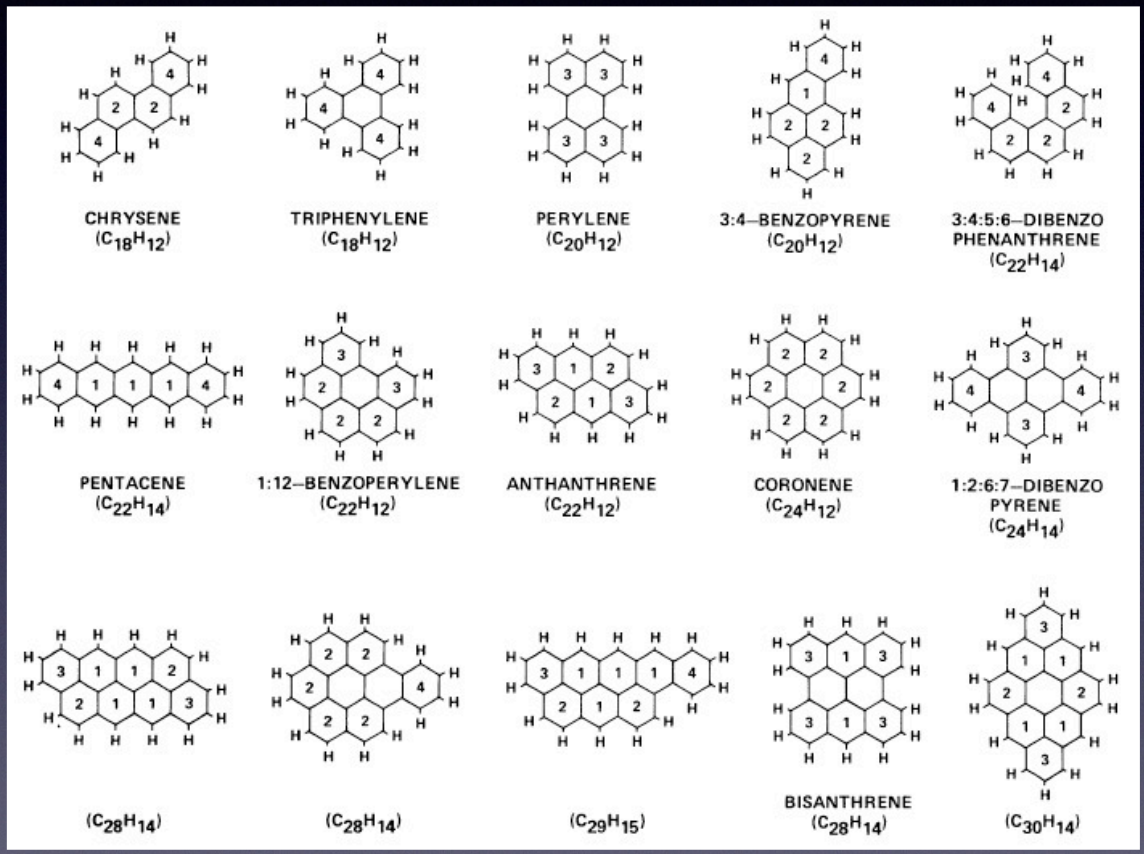
PAKs in de planeet-vormende schijf rond HD 97048



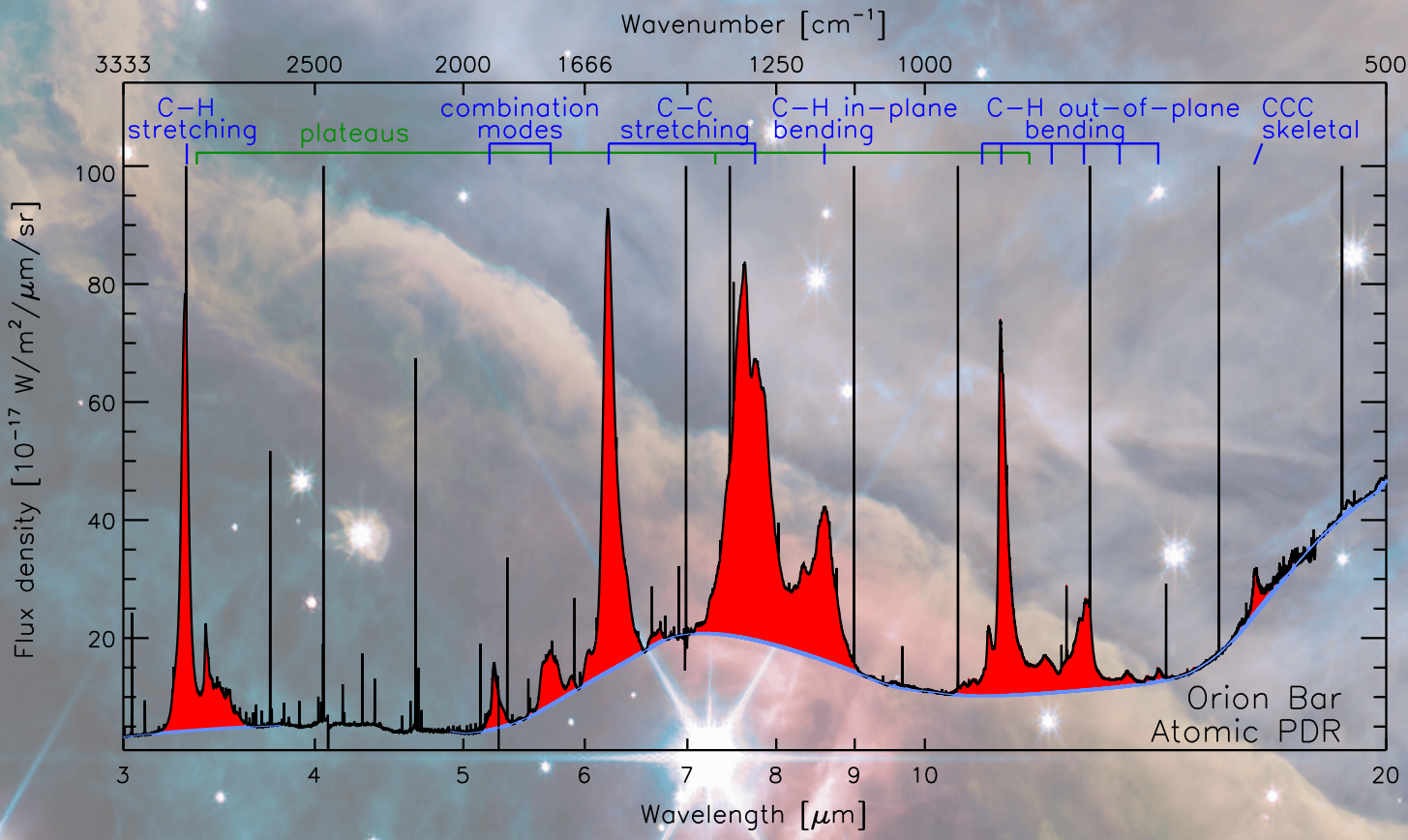
Doucet et al 2007, A&A, 470, 625

Interstellaire Polycyclische Aromatische Koolwaterstoffen

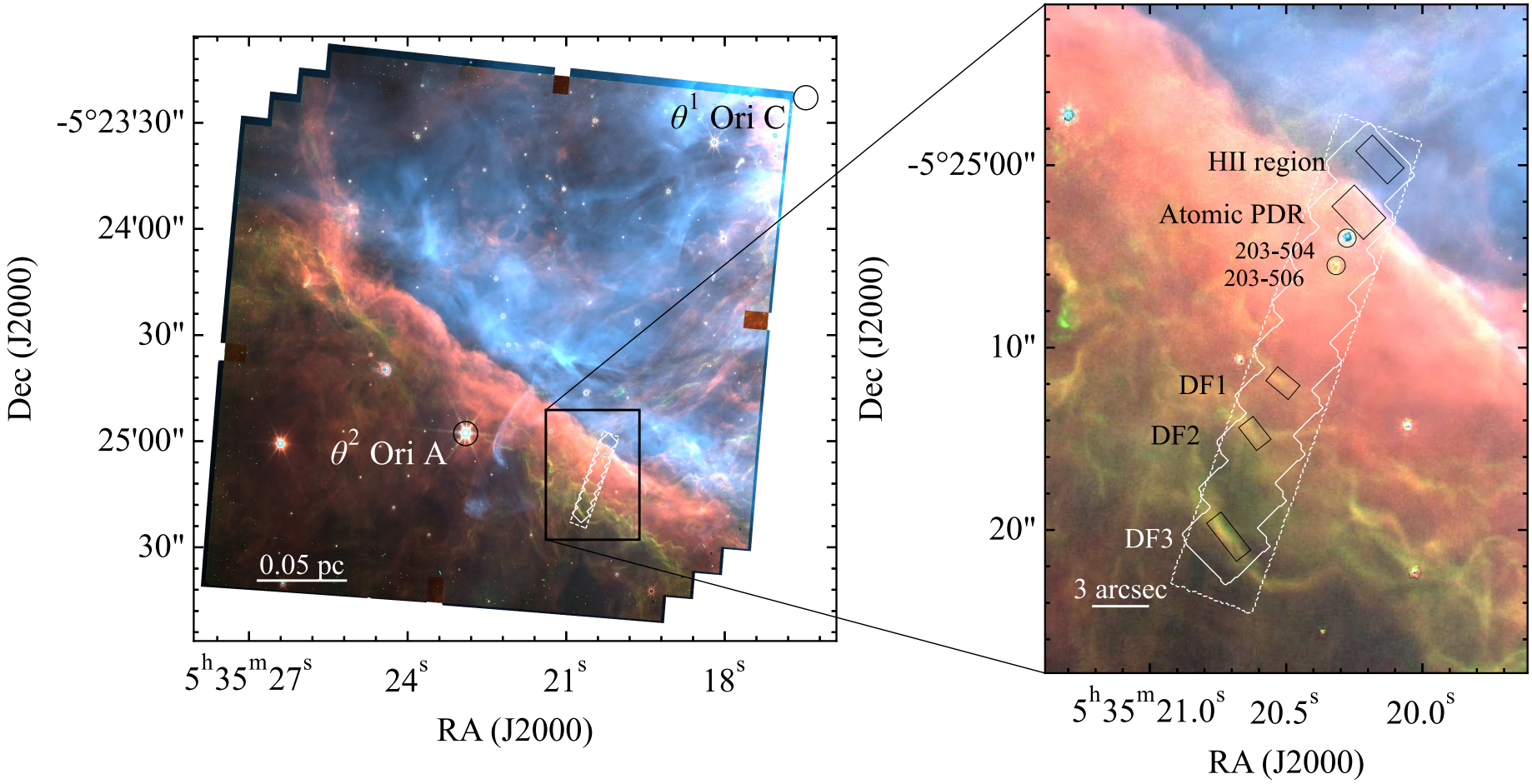
- Vlakke hexagonale koolstof structuur met waterstof aan de rand
- ~50 C-atomen
- 5% van de C in het heelal !
- PAKs zijn een belangrijke en alomtegenwoordig component van het heelal



JWST is a Game Changer



Spatial-Spectral Imaging



Orion Bar PAK Spectrum

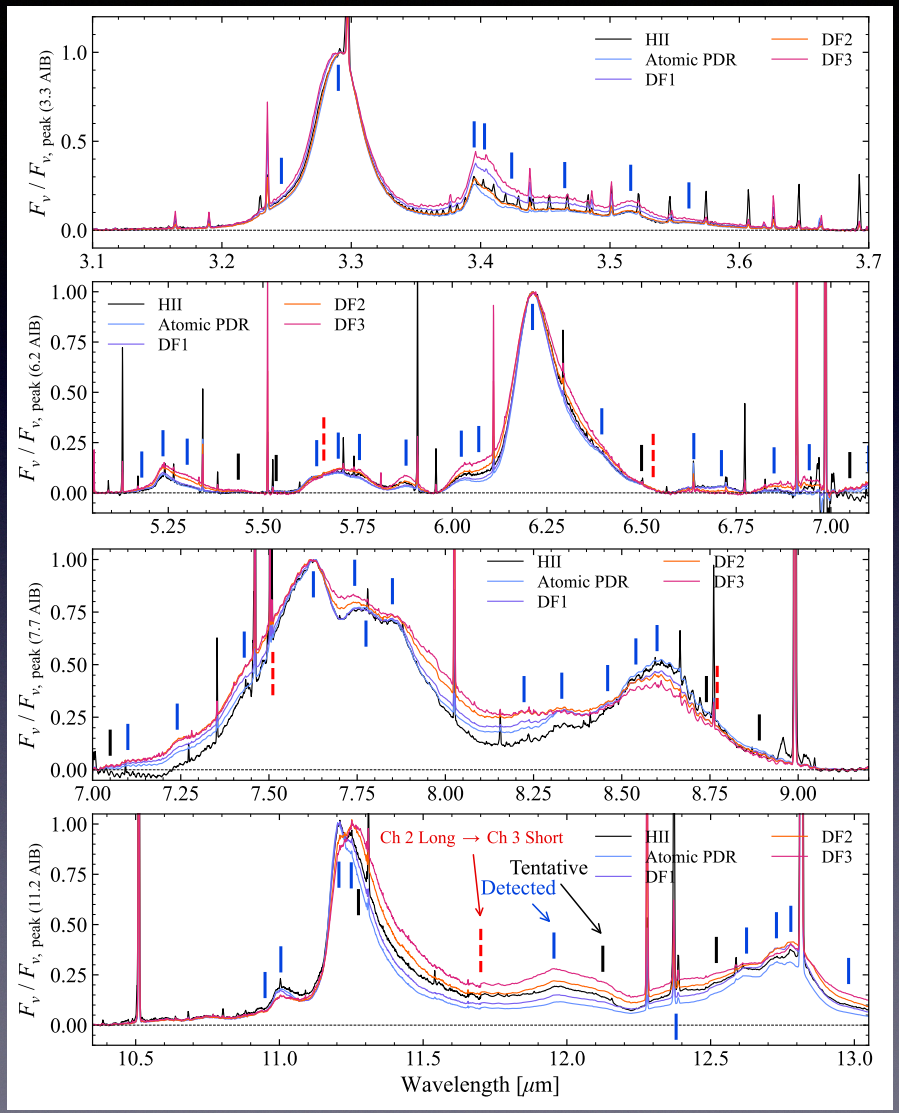
Ontzettend rijk spectrum

Sterke banden: 3.3, 6.2, “7.7”, 8.6, 11.2 12.7 μm

Subtiele spectrale variaties van positie tot positie

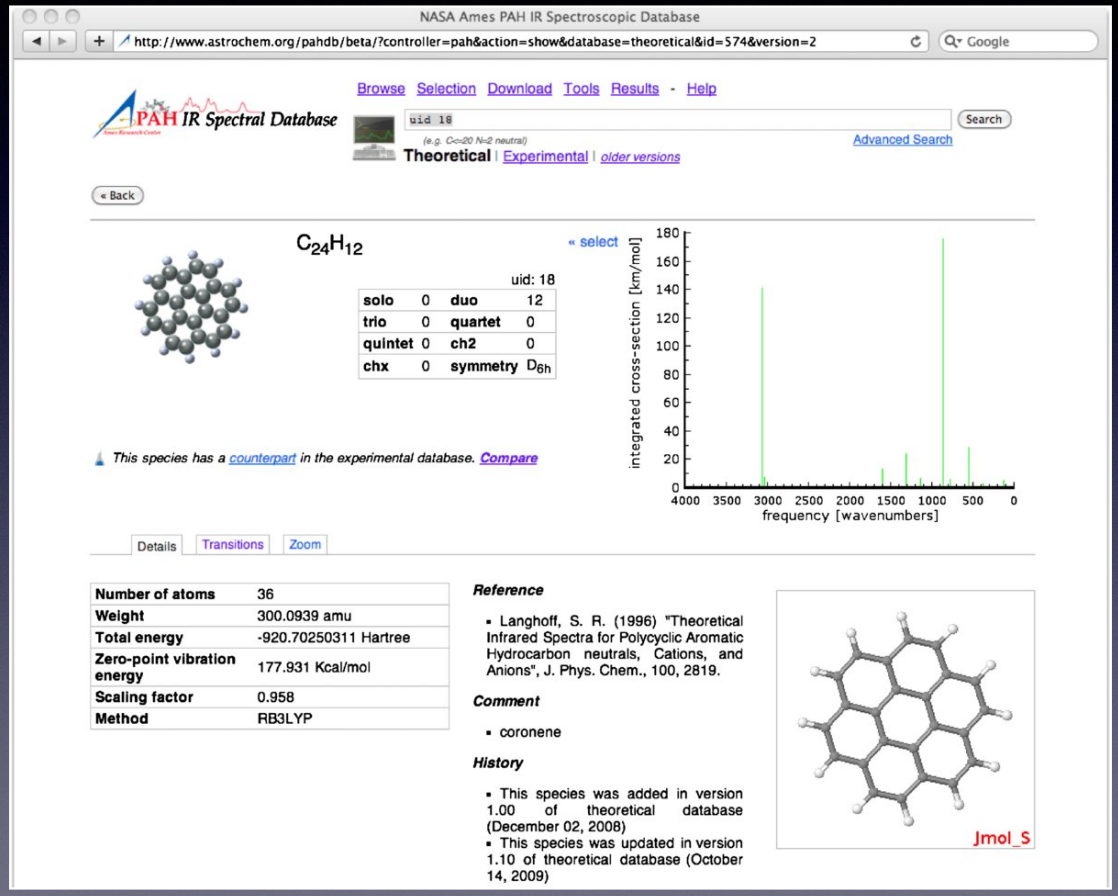
Veel banden met “rode vleugels” (3.3, 5.25, 6.2, 11.2 μm)

Chown+ 2023,ApJ, in press



PAK Spectrale Data Base

- 25 jaren quantum chemische berekeningen van ~4000 moleculen, tot 384 C-atomen
- Spectra gevalideerd door vergelijking met experimentele spectra gemeten in argon-ijs
- Correctie factor bepaalt
- Zijn die resultaten betrouwbaar wanneer gas fase spectra geanalyseerd worden ?



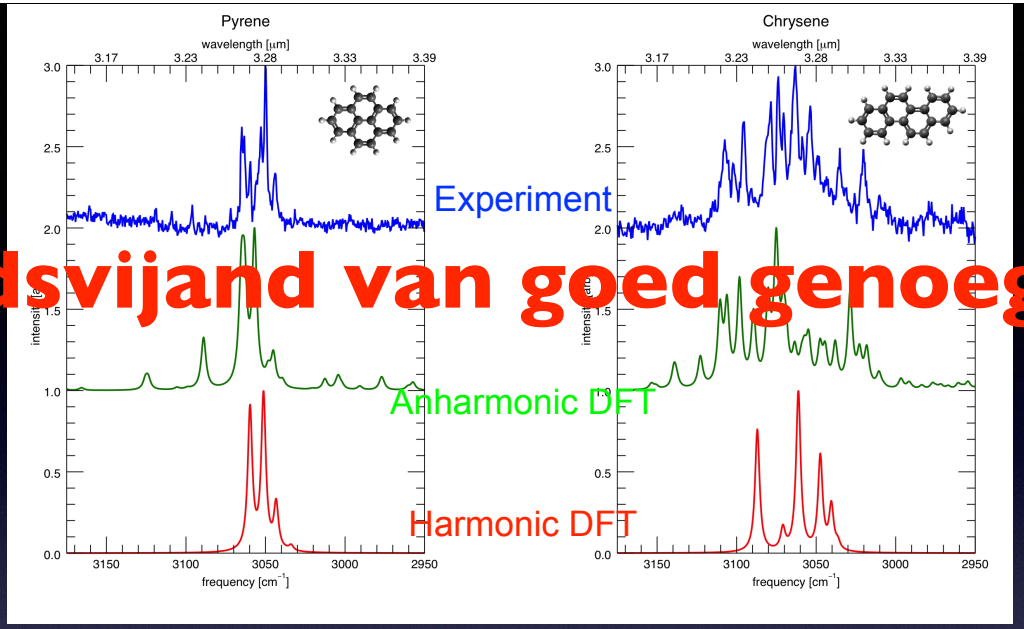
http://www.astrochemistry.org/pahdb/

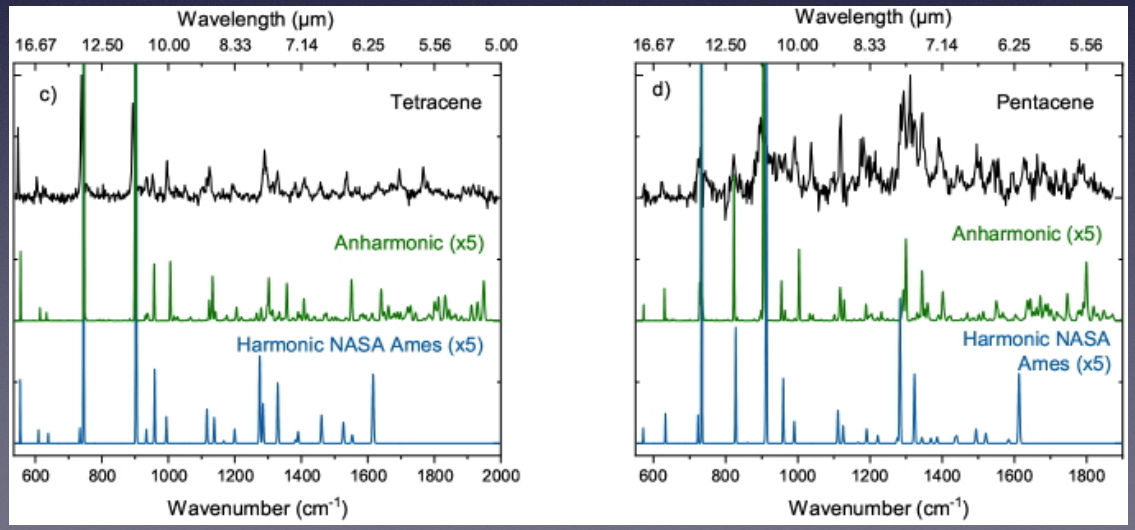
Bauschlicher et al, 2010, ApJS, 189, 341
Boersma et al, 2014, ApJS, 211, 8
Bauschlicher et al, 2018, ApJS, 234, 32

Anharmoniciteit

Perfectie is de doodsvijand van goed genoeg

- Harmonic berekeningen hebben een scalings factor (~0.96) nodig
- Anharmonische berekeningen zijn in goede (±0.2%) overeenstemming zonder schaling





Mackie et al, JCP, 2015, 143, 224314; 2016, JCP, 145, 084313; 2018, PCCP, 20, 1189
Maltseva et al, 2015, ApJ, 814, 23, 2016, ApJ, 831, 58
Lemmens et al., 2019, A&A, 628, A130

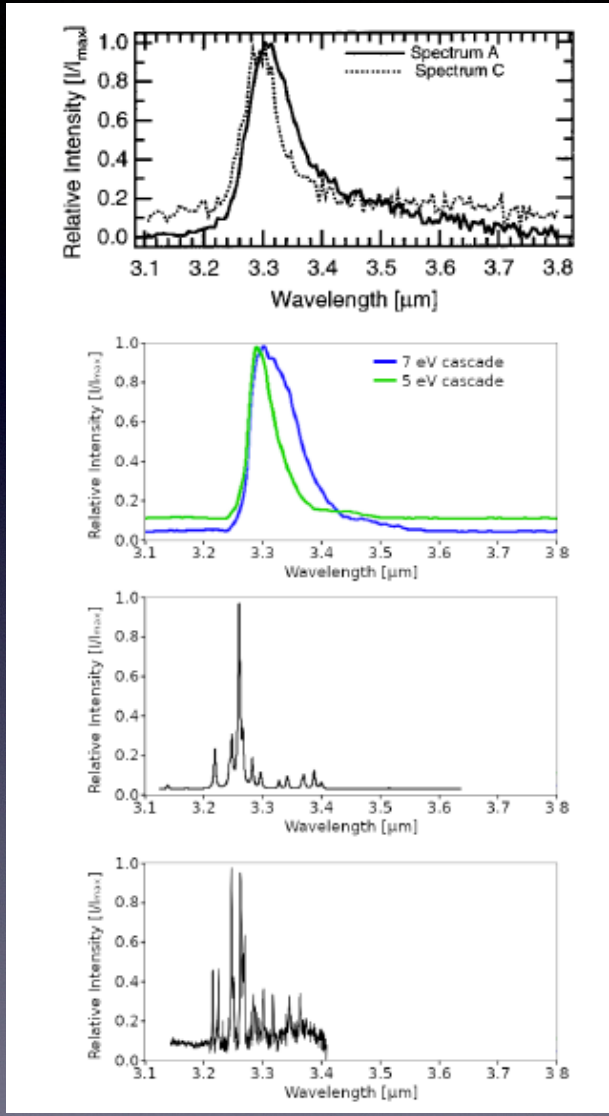
Absorptie vs Emissie: Anharmoniciteit is cruciaal

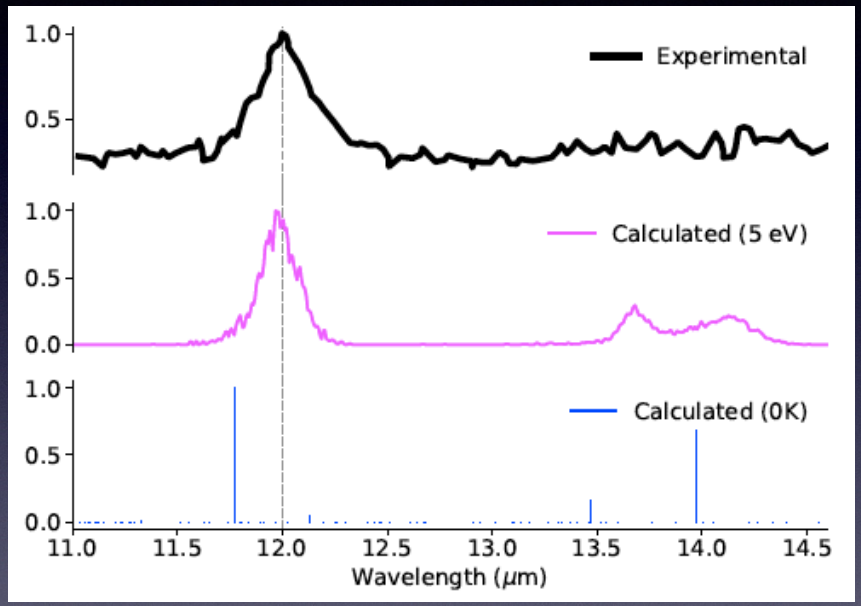
gemeten emissie spectrum

berekend emissie spectrum

gemeten absorptie spectrum

berekend absorptie spectrum





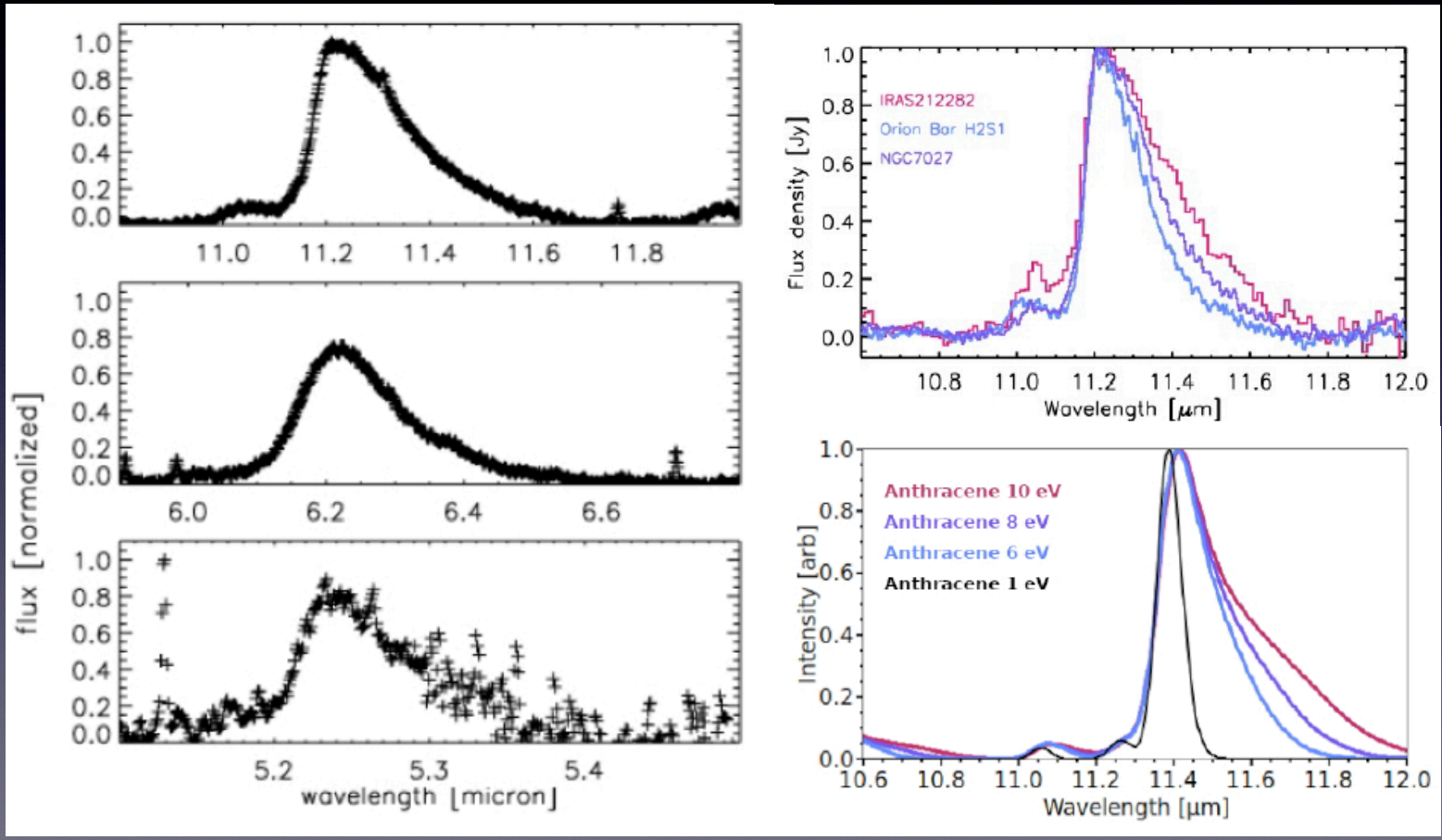
Naphthalene

Cooke at al., 1998, JPC A, 102, 1465
Mackie et al., 2015, JCP, 143, 224314
Maltseva et al, 2015, ApJ, 814, 23
Mackie et al., 2022, JPC A, 126, 3198

Pyrene

Schlemmer et l., 1994, Science, 265, 1686
Wagner et al 2000, ApJ, 545, 854
Maltseva et al, 2016, ApJ, 831, 58
Mackie et al., 2016, JCP, 145, 084313
Chen et al, 2018, A&A, 618, A49

De Cascade: Anharmoniciteit & Emissie Profiel



Boersma et al, 2009, ApJ, 690, 1208; Pech et al., 2002, A&A, 388, 639; Mackie et al., 2022, JPC A, 126, 3198

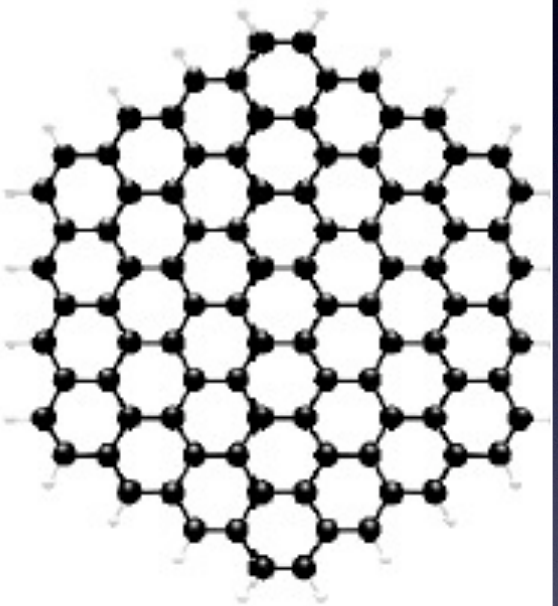
“GrandPAH”

De infrarood spectra zijn opvallend hetzelfde met name in de meest extreme gebieden van het interstellaire medium

15-20 μm spectrale gebied is karakteristiek voor C-skelet vibraties en heel molecuul specifiek: interstellaire spectra bevatten slechts een paar banden

PAKs absorberen zo’n 100 millioen UV fotonen over hun levensduur ⟶ wat kapot kan, gaat kapot

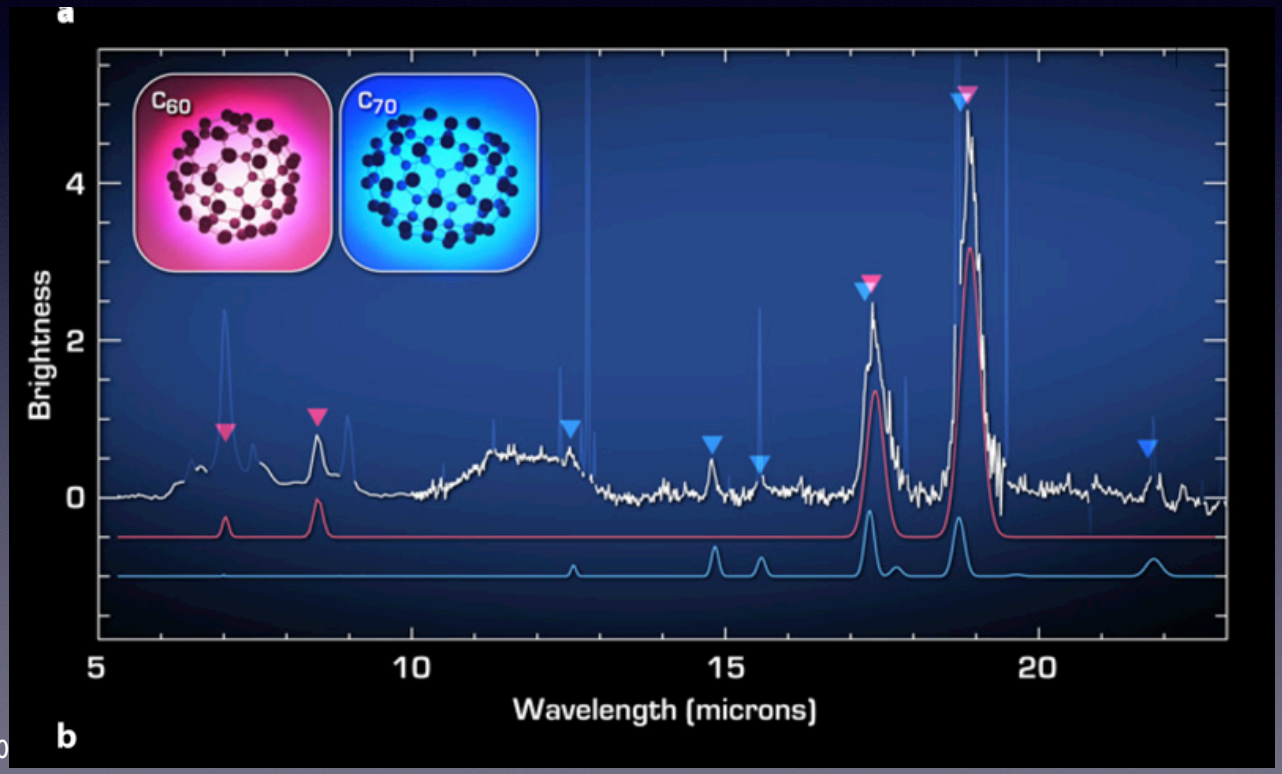
$C_{96}H_{24}$



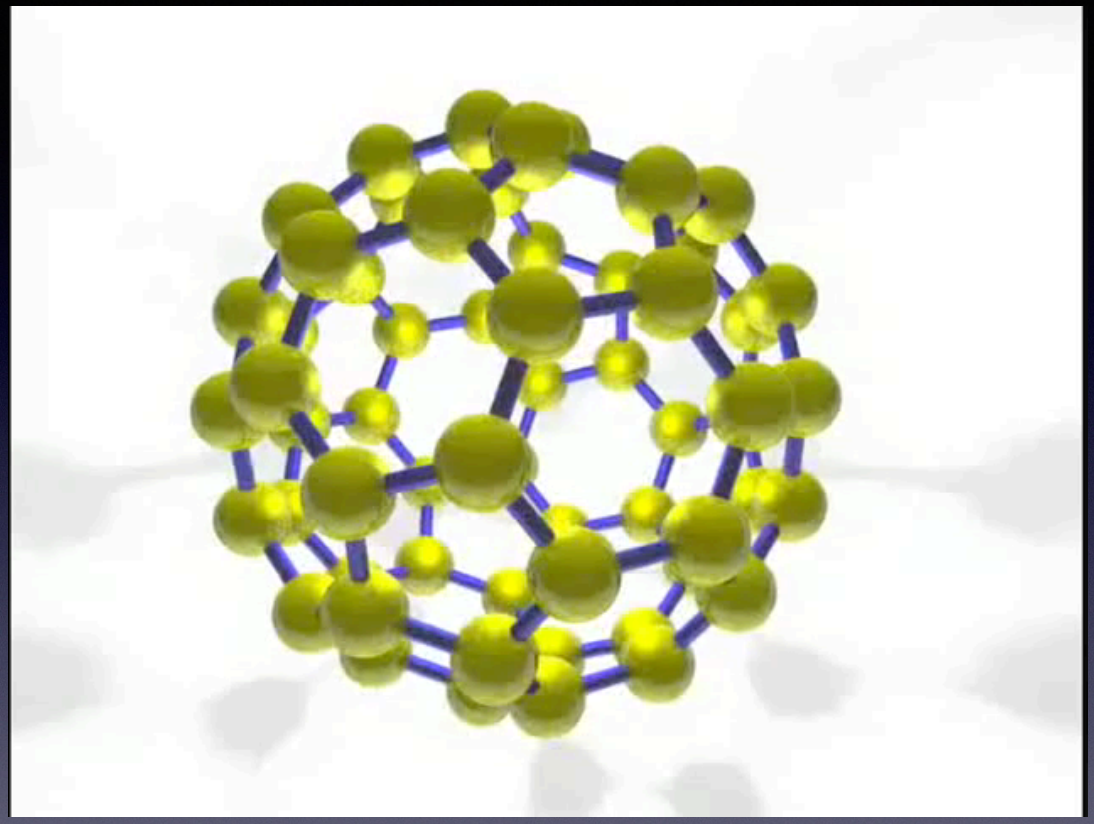
Interstellaire PAK familie wordt gedomineerd door een paar, extreem stabiele moleculen: De **GrandPAHs**

De Kleindochter van de GrandPAH

Het Grootste Molecuul in de ruimte: C_{60} in de Planetaire Nevel, TC1

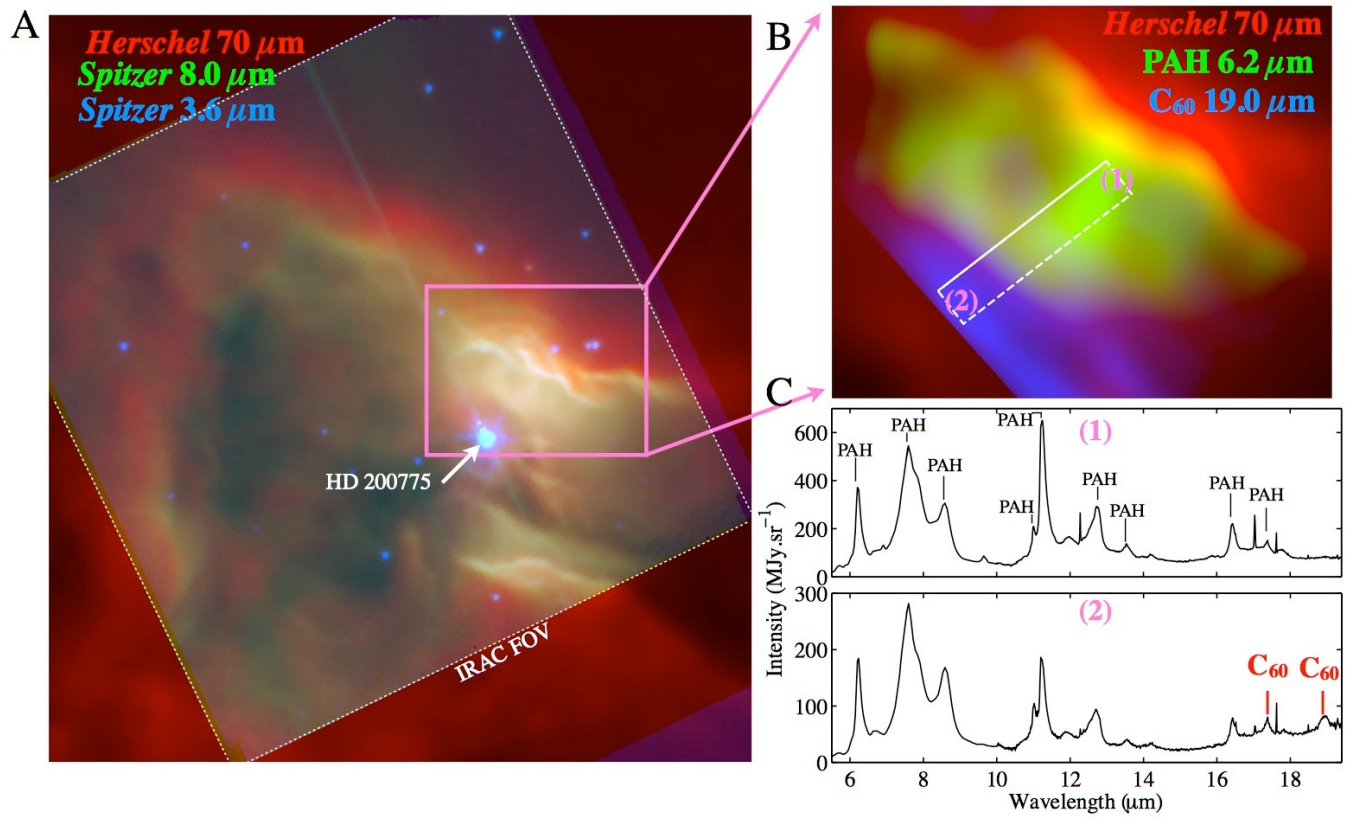


Cami et al, 2010, Science, 329, 1180



C_{60}: Moleculaire Voetbal

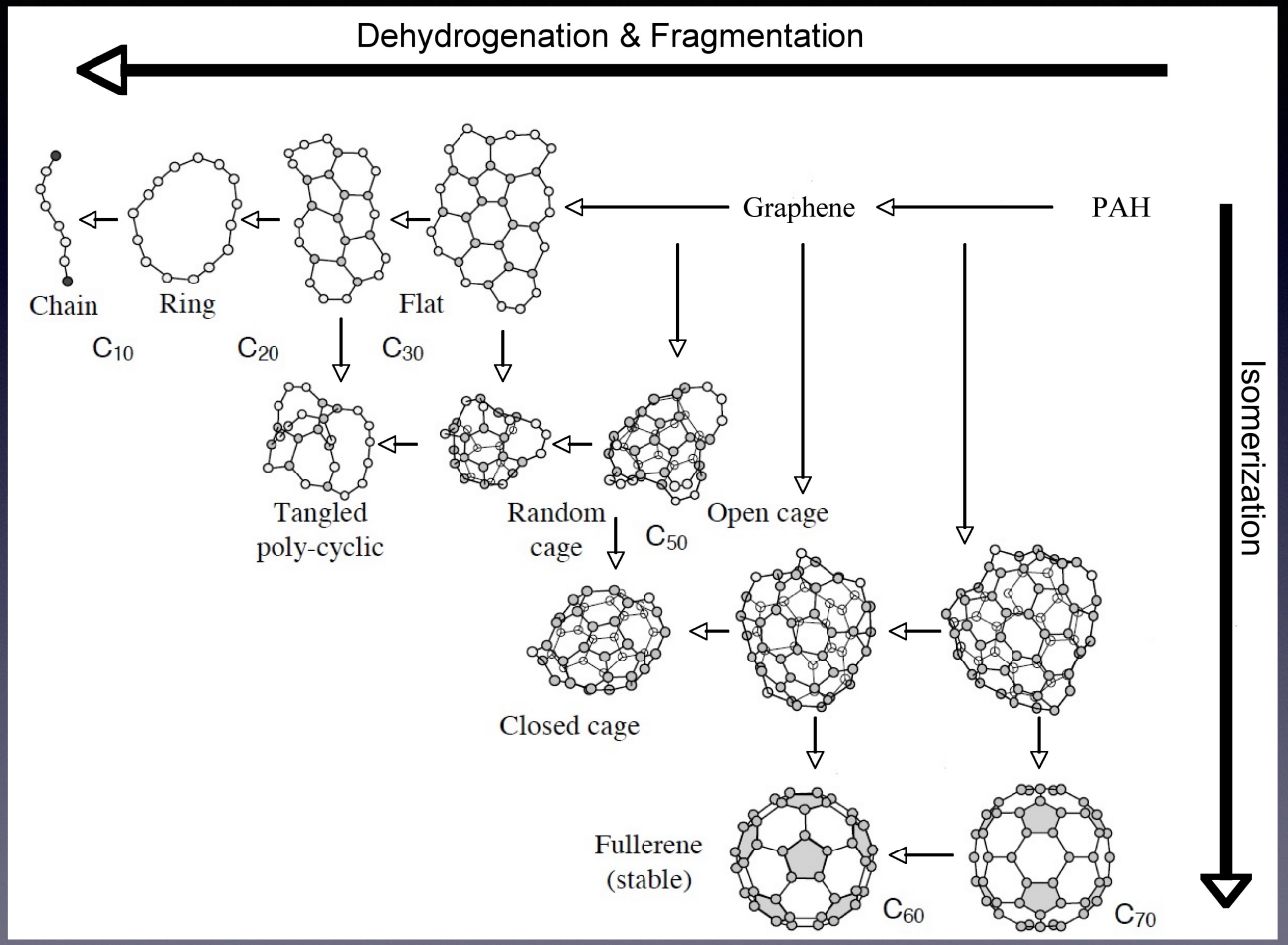
PAKs & Buckyballs in NGC 7023



Berne & Tielens, 2012, PNAS, 109, 401

PAH photolyze

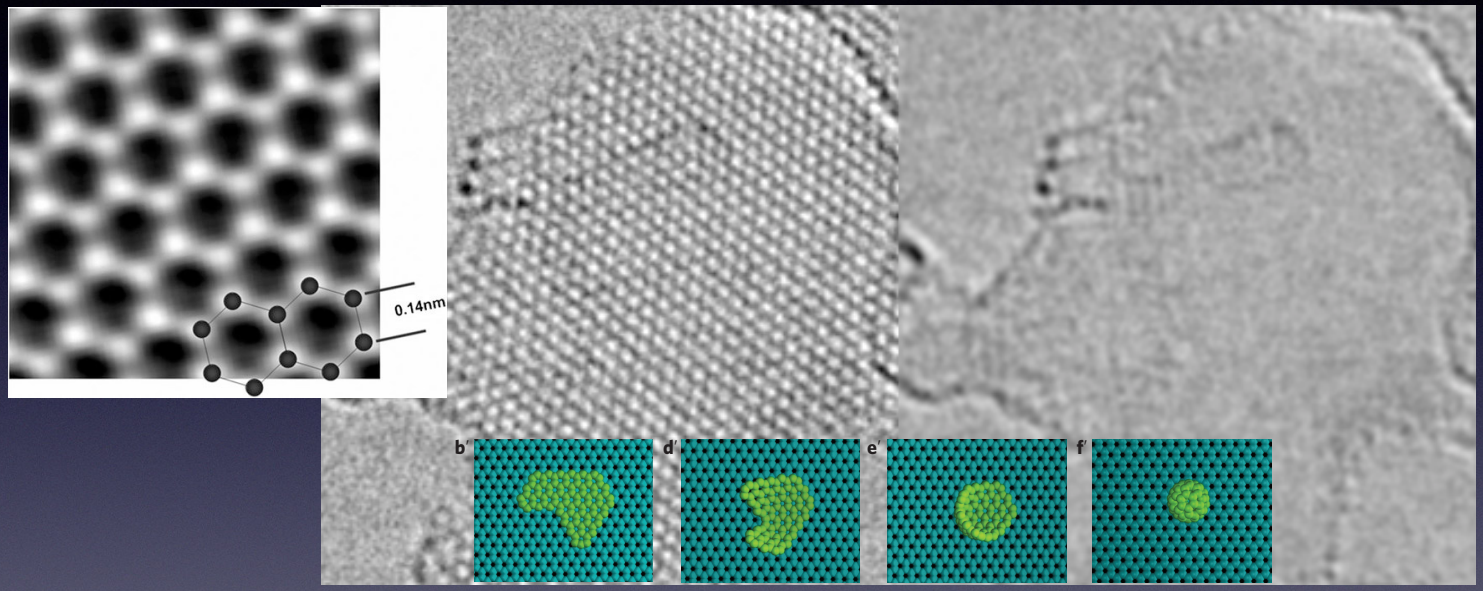
- Dehydrogenatie & isomerizatie
- Stabiele tussenvormen: kooien & fullerenes
- Fragmentatie producten: koolwaterstof ringen & ketens



Berne & Tielens, 2012, PNAS, 109, 401
Pety et al, 2005, A&A, 435, 885
Wehres et al, 2010, A&A, 518, 36

van Graphene tot C_{60}

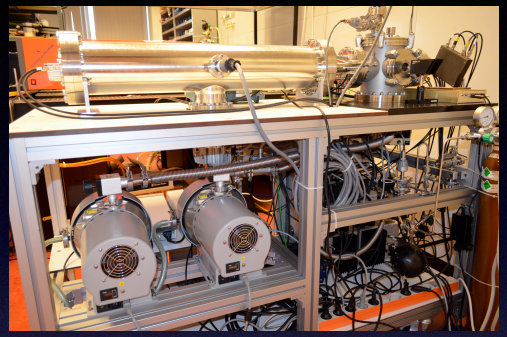
[National Center for electron microscopy]



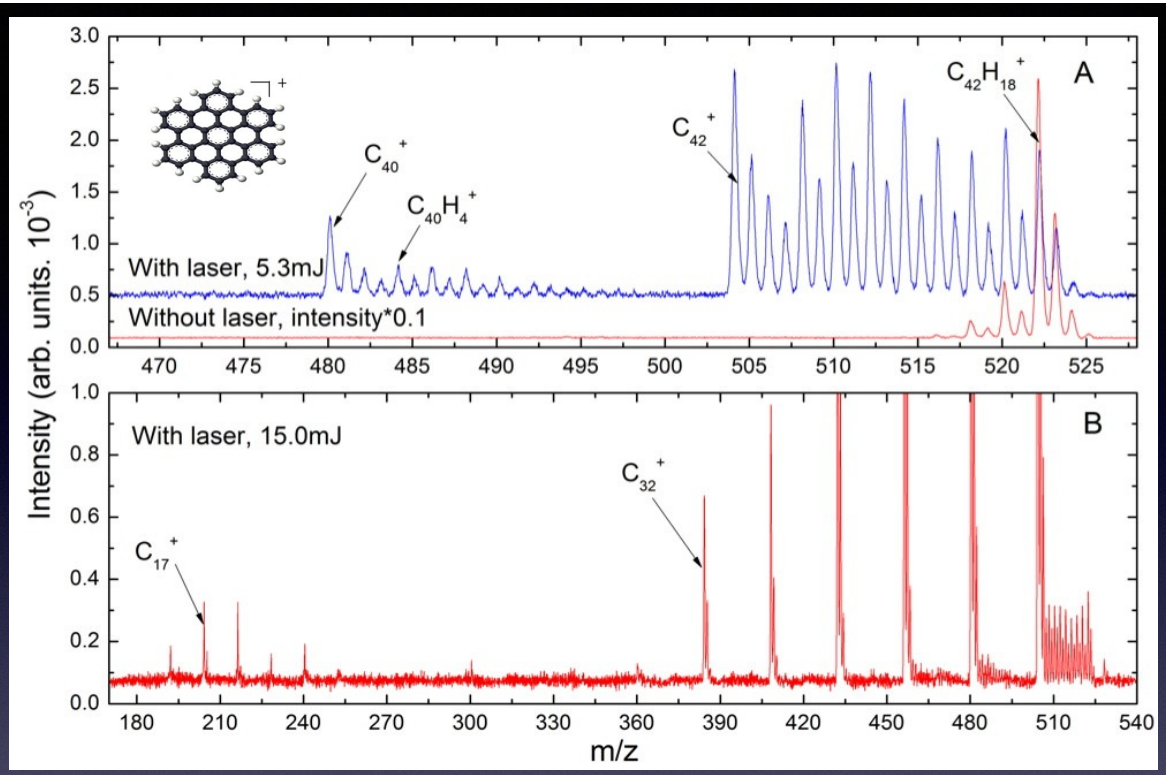
[Chuvilin et al. Nature Chem. 2010]

C_{60} wordt gevormd uit grafeen; hier gedreven door electronen bestraling

PAK photolyze



- Multifotonen absorptie in een laser pulse leidt to fragmentatie
- Veel pulsen stropen het molecuul stuk voor stuk van atomen
- Eerst, verlies van alle H, gevolgd door verlies van C_2 (magische getallen)

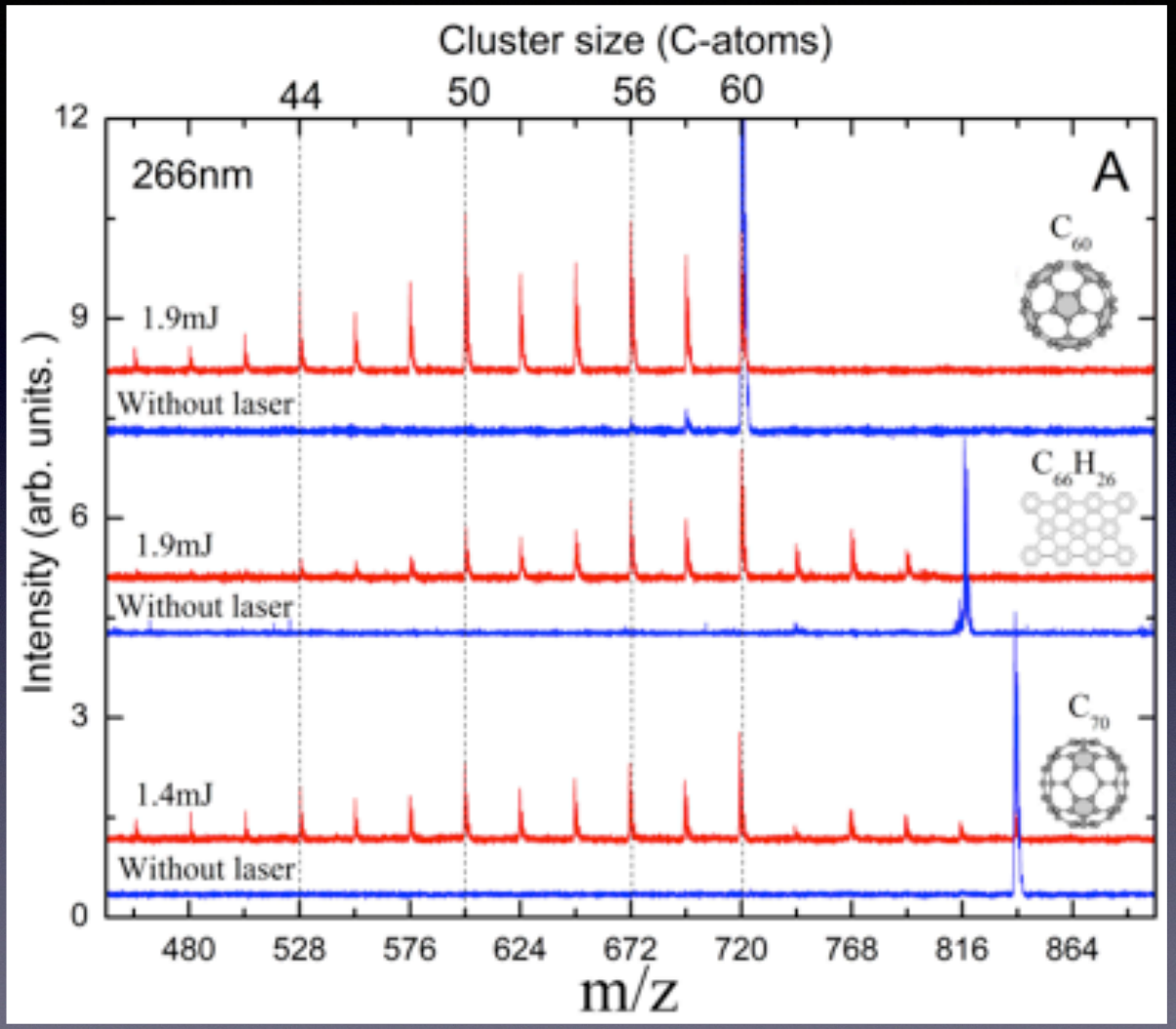


Ekern et al, 1997, ApJ, 488 L39
Joblin et al, 2003, Edp. Sci. Conf. Ser. 175
Zhen et al, 2014, Chem Phys Lett, 592, 211

Top-Down Chemie

van PAHs naar C_{60}

UV photolyze met 355 nm straling

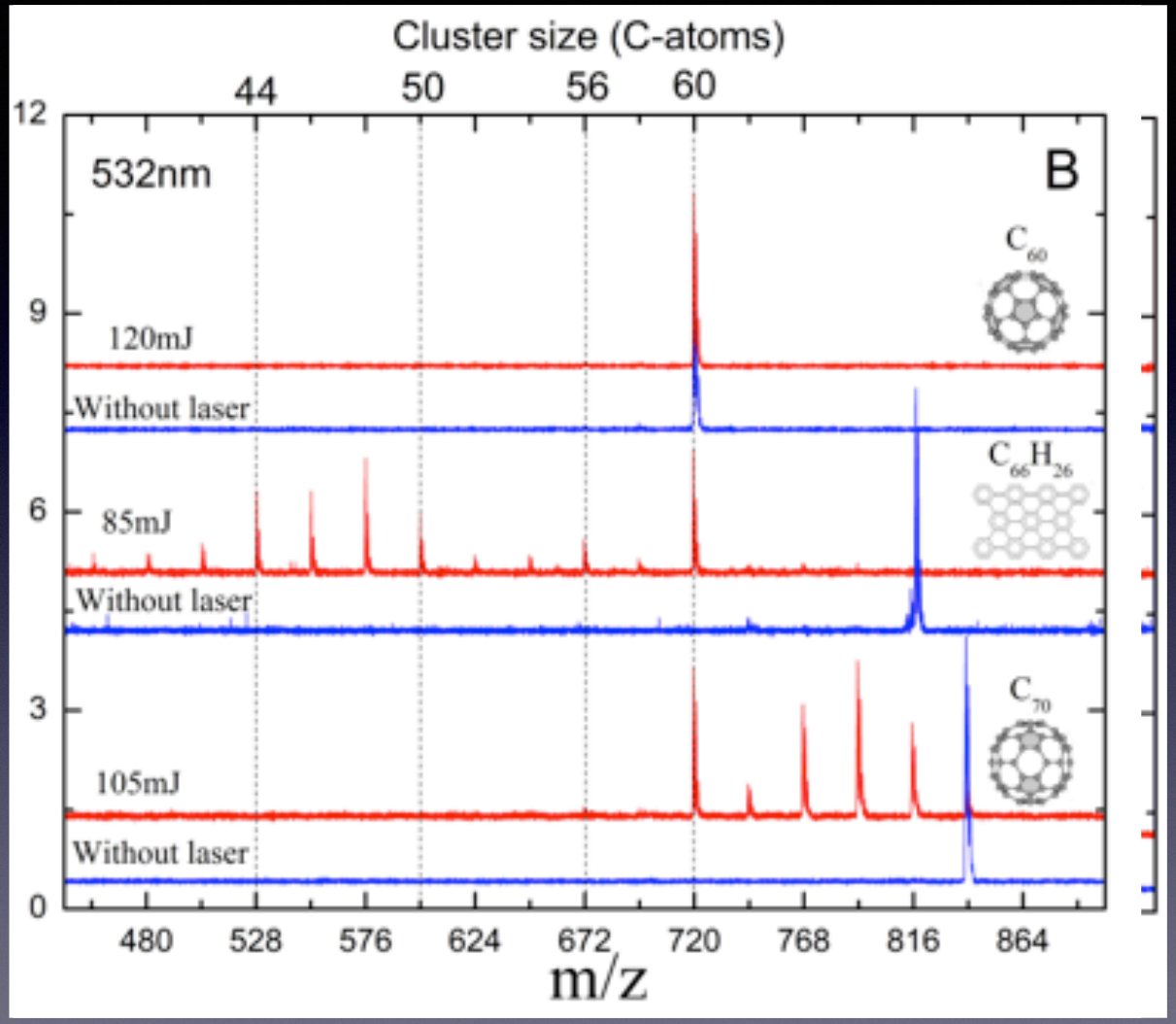


Zhen et al, 2014, ApJ, 797, L30

Top-Down Chemie

van PAHs naar C_{60}

UV photolyze met 532 nm straling



Zhen et al, 2014, ApJ, 797, L30

Waarom zijn astrochemici geinteresseerd in de GrandPAH ?



theobromine



caffeine

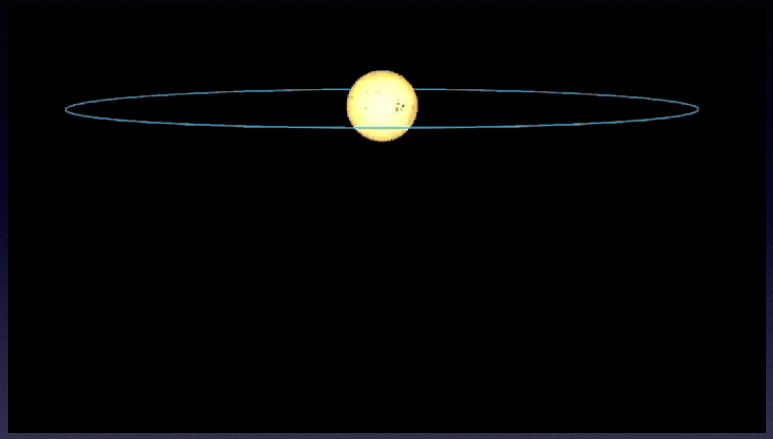


Een grandpah is gesignaleerd in California

Samenvatting

- Nieuw paradigma: Leven is wijdverspreid in het Heelal !
- Planeten betrekken water en organisch materiaal van over het hele planetenstelsel
- Veel van dit materiaal is interstellair erfgoed
- Interstellaire chemie leidt tot een brede verzameling van organisch materiaal
- De bouwstenen van het leven kunnen zijn ingebracht van elders
- Deze processen zijn heel algemeen

Kepler, TESS & Plato



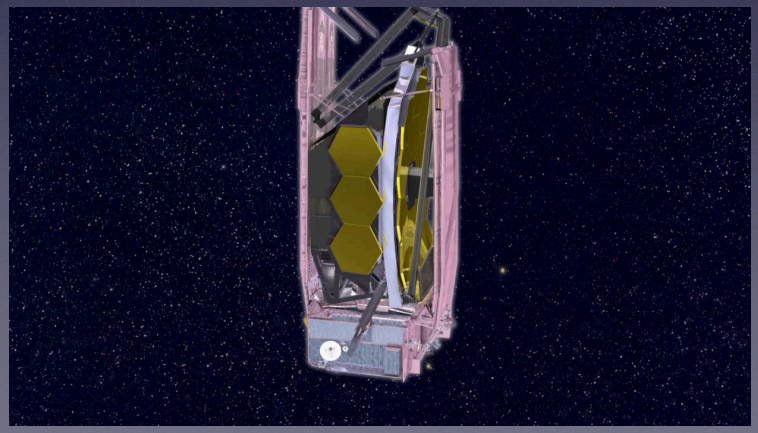
ALMA



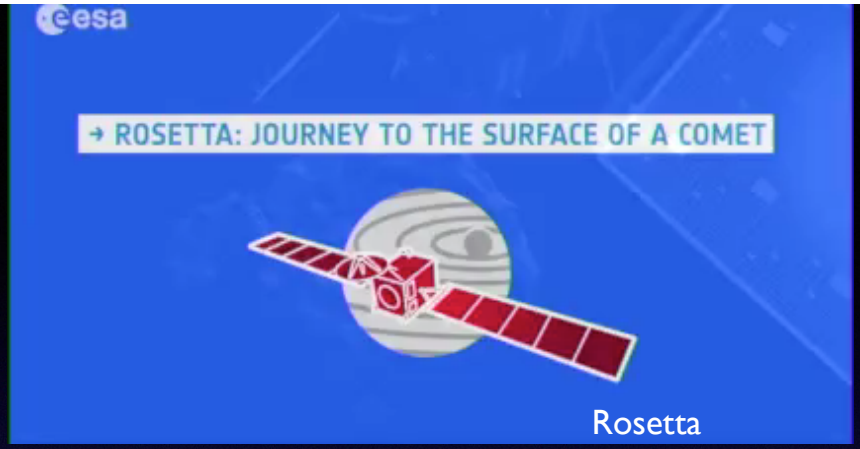
FAST



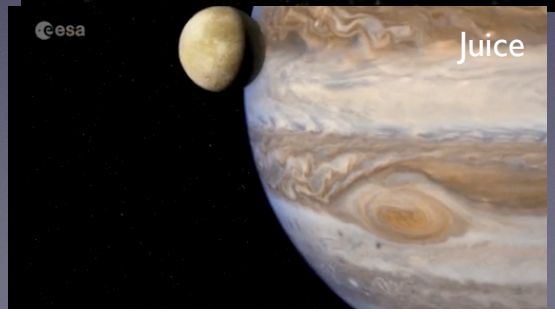
James Webb

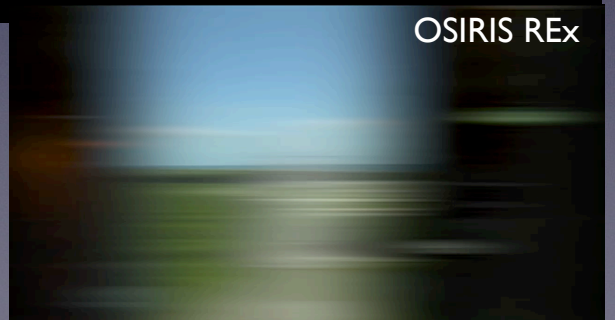


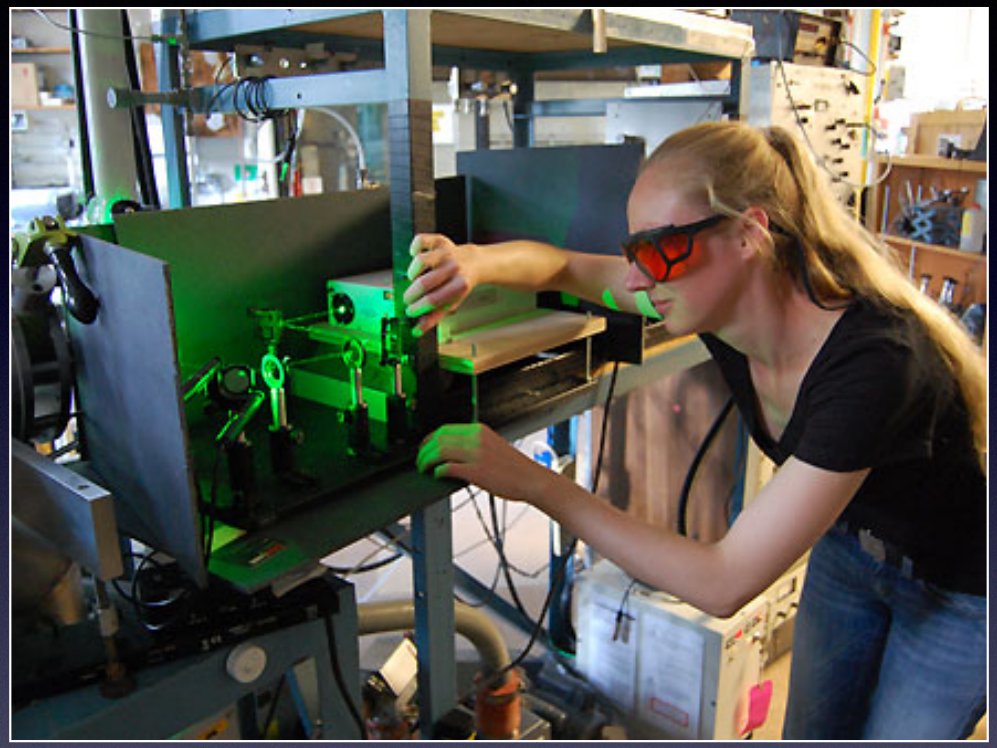

Cassini/Huygens


esa
ROSETTA: JOURNEY TO THE SURFACE OF A COMET
Rosetta


Stardust
Curiosity


esa
Juice


OSIRIS REx



Astronomie kan heel precies zijn. Echter nauwkeurigheid vereist diepgaande samenwerking met moleculaire fysici, fysisch chemici, spectrocopisten, planetaire wetenschappers, aardwetenschappers, en biochemici