

Streszczenie popularnonaukowe projektu, wersja PL

Na ziarnach pyłu międzygwiazdowego, w bardzo zimnych obłokach gazu, tworzą się cienkie warstwy lodu. Nie jest to zwykły lód wodny, ale mieszanina prostych związków zawierających węgiel, wodór, tlen i azot. Takie lodowe powłoki działają jak mikroskopijne reaktory, w których promieniowanie gwiazd i powolne ogrzewanie prowadzą do powstawania coraz bardziej złożonych cząsteczek. Obserwacje teleskopów takich jak James Webb Space Telescope (JWST) pokazują, że te lody są chemicznie złożone, ale ich widma – czyli „odciski palców” w podczerwieni – bardzo trudno jest jednoznacznie zinterpretować, bo różne mieszaniny lodów, różny stopień ich napromienienia oraz różne formy tej samej cząsteczki mogą dawać bardzo podobne sygnały. W naszym projekcie chcemy ustalić, jakie procesy zachodzą z udziałem prostych cząsteczek zamrożonych na kosmicznym pyłe pod wpływem promieniowania gwiazd – jak łączą się one, rozpadają i przekształcają w lodzie oraz jak te przemiany przekładają się na sygnał rejestrowany przez teleskopy.

Skupiamy się na prostych, ale astrochemicznie ważnych cząsteczkach zawierających grupy $C\equiv N$, $C=O$ i $N-H$. Należą do nich różne formy izocyjanianu wodoru (rodzina $HNCO/HOCN/HCNO$ i jon OCN^-), formamid, proste nityle i aminonityle oraz niewielkie kwasy tlenowe, takie jak kwas mrówkowy i węglowy. W wybranych doświadczeniach użyjemy także nadtlenu wodoru jako źródła rodników OH . Związki te tworzą sieci wiązań wodorowych i są czułymi „czujnikami” lokalnego środowiska w lodzie: ich widma reagują na to, czy występują jako pojedyncze cząsteczki, określone kompleksy czy mikroskopijne ziarna lodu.

W części eksperymentalnej będziemy przygotowywać ziarna lodu zawierającego wodę, tlenek i dwutlenek węgla, metanol i azot, z domieszkami badanych cząsteczek. Próbki będą osadzone na mocno schłodzonym podłożu w wysokiej próżni, co pozwala odtworzyć warunki panujące w obłokach międzygwiazdowych. Następnie zmierzmy ich widma w podczerwieni (IR) oraz w zakresie UV-Vis, śledząc zmiany podczas kontrolowanego napromieniania światłem i stopniowego ogrzewania. Widma IR pokażą, jakie cząsteczki i izomery są obecne w lodzie, natomiast widma UV-Vis pozwolą wykryć rodniki, stany przeniesienia ładunku oraz zmiany związane z agregacją.

Równolegle prowadzone będą zaawansowane obliczenia kwantowo-chemiczne, dzięki którym wyznaczmy struktury badanych cząsteczek i ich niewielkich agregatów, ich energie oraz przewidywane widma w różnych warunkach. Pozwoli nam to powiązać obserwowane przesunięcia i zmiany kształtu pasm w widmach z określonymi typami agregacji i lokalnym otoczeniem cząsteczek oraz wskazać, które ścieżki fotochemiczne (np. rozpad, izomeryzacja czy reakcje z udziałem rodników OH) są w danych warunkach najbardziej wiarygodne.

W efekcie projektu powstanie uporządkowana „biblioteka” widm i scenariuszy reakcji dla wybranej grupy prostych związków zawierających węgiel, wodór, azot i tlen w lodach astrofizycznych. Dane te będą mogły być wykorzystane jako punkt odniesienia przy analizie widm lodów obserwowanych przez JWST i inne teleskopy oraz jako wkład do modeli astrochemicznych opisujących ewolucję ziaren w obłokach i dyskach protoplanetarnych, czyli środowisk, w których rodzą się układy planetarne.