

# Diffuse Banden im All

Laborexperimente unter astrophysikalischen Bedingungen sind notwendig, um die ständig wachsende Zahl der Beobachtungsdaten richtig interpretieren zu können

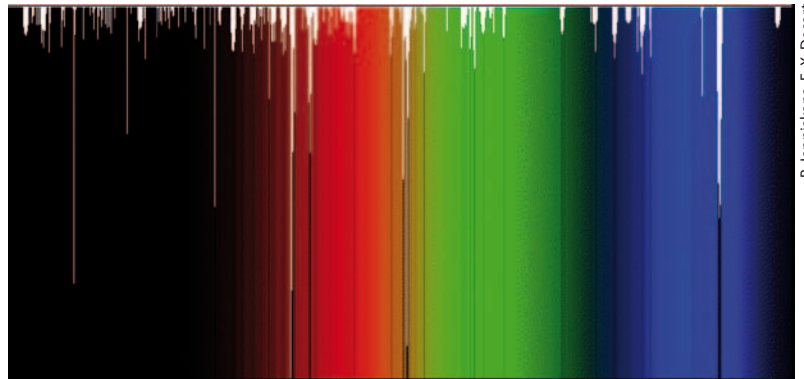
Friedrich Huisken und Cornelia Jäger

Erdgebundene und satellitengestützte Beobachtungen, deren Anzahl und Qualität kontinuierlich zunehmen, führen laufend zu neuen Erkenntnissen in der Astronomie. Um diese wachsende Datenflut optimal nutzen und insbesondere die beobachteten Spektren verstehen zu können, bedarf es neben Modellrechnungen auch gezielter Laborexperimente unter Bedingungen, die jenen im All entsprechen. Ein Beispiel ist eines der ältesten Rätsel der Astronomie: das Phänomen der diffusen interstellaren Banden (DIBs), für das eine endgültige Klärung noch aussteht.

Astrophysikalische Prozesse basieren auf einer Vielzahl von physikalischen und chemischen Einzelschritten, die man gründlich verstehen muss, um astronomische Beobachtungen korrekt interpretieren und weiterreichende Schlüsse ziehen zu können. Von besonderer Bedeutung sind elementare Prozesse, die traditionell in der physikalischen Chemie untersucht werden, wie die Wechselwirkung von Atomen, Molekülen, Clustern, Nanoteilchen und Staubpartikeln untereinander oder mit verschiedenen Strahlungsfeldern. Nur wenn diese mikroskopischen Prozesse gründlich verstanden sind, lassen sich die Beobachtungen direkt interpretieren und makroskopische Vorgänge und Strukturen mithilfe von Computern modellieren.

Die Bedeutung dieser Grundlagenforschung wird besonders deutlich angesichts der Fülle von Beobachtungsdaten, die Infrarot-Weltraumteleskope wie Spitzer und Herschel bereits heute zur Verfügung stellen oder die z. B. vom kürzlich in Betrieb genommenen Submillimeter-Array ALMA in der Atacama-Wüste zu erwarten sind. Die Vielzahl der involvierten Prozesse erfordert eine konzertierte Aktion von Astronomen, Physikern, Mineralogen, Chemikern und Biologen.

Diese Überlegungen gelten in besonderer Weise für die Erforschung des interstellaren Mediums (ISM) einschließlich seiner Molekül- und Staubwolken. Die gemeinsame Laborastrophysikgruppe des Max-Planck-Instituts für Astronomie und der Universität Jena führt daher Experimente in Apparaturen durch, welche die Bedingungen des Weltraums möglichst wirklichkeitsnah nachstellen. Dazu gehören tiefe Temperaturen, wie sie z. B. in interstellaren Molekülwolken vorherrschen (10 – 50 K), ebenso wie die hohen Temperaturen in alten, „entwickelten“ Sternen. Zudem muss ein ausge-



P. Jenniskens, F.-X. Desert

Abb. 1 Die diffusen interstellaren Banden (DIBs), hier als schwarze Linien im sichtbaren und nahen infraroten Spektralbereich sowie als normiertes Intensitäts-

spektrum, weiß dargestellt, beruhen auf der Absorption von Sternenlicht durch bislang noch nicht identifizierte Materie [2].

zeichnetes Vakuum gewährleisten, dass die zu untersuchenden Atome, Moleküle, Cluster und Staubteilchen nicht miteinander wechselwirken. Dafür stehen der Arbeitsgruppe in Jena leistungsfähige Hochvakuum-Apparaturen zur Verfügung, die es ermöglichen, frei propagierende Molekül- und Nanoteilchenstrahlen zu erzeugen und mit hochsensitiven Lasertechniken spektroskopisch zu charakterisieren.

Auf dem Weg von fernen Sternen zu uns durchquert Licht das interstellare Medium, wo Molekül- und Staubwolken es durch Streuung und Absorption in charakteristischer Weise verändern, sodass die beobachteten Spektren die Fingerabdrücke der Moleküle und Staubteilchen enthalten. Zusätzliche Signaturen entstehen, wenn Strahlung die Moleküle und Staubteil-

## KOMPAKT

- Die über 400 diffusen interstellaren Banden (DIBs) treten zwischen nahem UV und nahem IR auf und sind viel schwächer und breiter als die üblichen Absorptionsbanden von Atomen und Ionen.
- Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAKs) im interstellaren Medium kommen als Verursacher infrage. Sie lassen sich im Labor unter entsprechenden Bedingungen herstellen und spektroskopieren.
- Bislang gemessene Spektren kleiner PAKs lassen sich keinen spezifischen DIBs zuordnen, zudem sollten Mischungen größerer PAKs zu strukturlosen Spektren führen.
- Wie die Experimente zeigen, tragen PAKs zur UV-Absorption bei 217,5 nm bzw. zur interstellaren Extinktion bei.

Prof. Dr. Friedrich Huisken, Dr. Cornelia Jäger, Laborastrophysik, Institut für Festkörperphysik, Universität Jena, Helmholtzweg 3, 07743 Jena

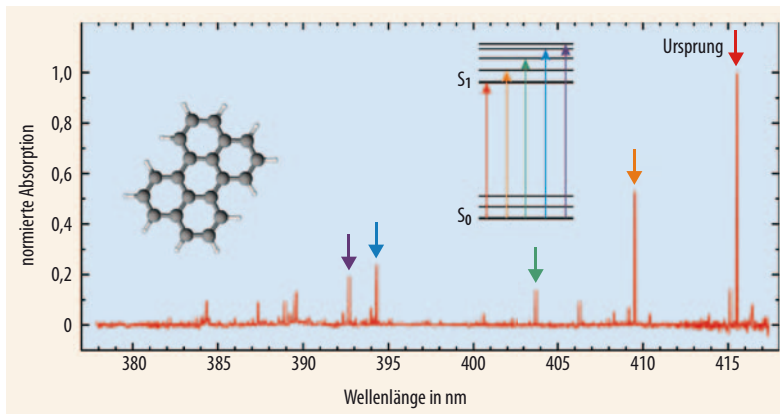


Abb. 2 Das elektronische Anregungsspektrum von Perylen (Struktur siehe Inset) zeigt den Übergang in den untersten elektronisch angeregten Zustand ( $S_1$ ). Die stärkste, mit „Ursprung“ bezeichnete Bande ist dem vibrationslosen Übergang zuzuordnen. Alle bei kürzeren Wellenlängen auftretenden Banden gehören zu Übergängen in vibrationsangeregte Zustände von  $S_1$ , wie im Energieniveaudia-gramm gezeigt.

chen anregt, die ihrerseits Licht mit niedriger Energie emittieren. Je nach Spektralbereich unterscheiden wir mehrere astrophysikalische Phänomene, über die uns die Spektren Auskunft geben und die Gegenstand aktiver Forschung sind. Dazu zählen die UV-Absorptionsbande bei 217,5 nm und die diffusen interstellaren Banden (DIBs) zwischen 440 und ca. 800 nm, die ebenfalls in Absorption beobachtet werden, sowie die als Emission sichtbare blaue Lumineszenz (BL) um 400 nm und die Extended Red Emission (ERE) zwischen 600 und 900 nm. Im Infraroten lassen sich sowohl Absorptions- als auch Emissionsbanden beobachten, die aromatischen IR-Banden (AIBs). Das ausgewählte Beispiel der DIBs soll zeigen, welchen Beitrag die Laborastrophysik zur Klärung dieses Phänomens zu leisten vermag.

### Diffus und interstellar

In den 1920er-Jahren entdeckte Mary L. Heger als Doktorandin am kalifornischen Lick Observatory die ersten DIBs [1]. Die Bezeichnung „diffus“ rührt daher, dass sie viel schwächer und breiter als übliche von Atomen oder Ionen herrührende Absorptionslinien waren. Heute sind bereits mehr als 400 Banden bekannt, zwischen nahem UV und nahem IR (Abb. 1). Da sie in Spektren geröteter Sterne zu sehen sind, lassen sie sich interstellaren Molekül- oder Staubwolken zuordnen (die Staubteilchen streuen das Sternenlicht, was den Blauanteil reduziert). Die heute primär diskutierten DIB-Quellen sind größere, im Wesentlichen aus Kohlenstoff bestehende Moleküle wie Kohlenstoff-Käfigmoleküle (Fullerene), Kohlenstoffketten oder polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAKs). Dass diese in großen Mengen im Weltraum auftreten, verraten entsprechende Vibrationsbanden in infraroten Emissionsspektren [3]. Als Molekül-gattung sind sie eindeutig nachgewiesen worden, jedoch ist es noch nicht gelungen, einzelne spezielle Vertreter im Weltraum zu identifizieren.

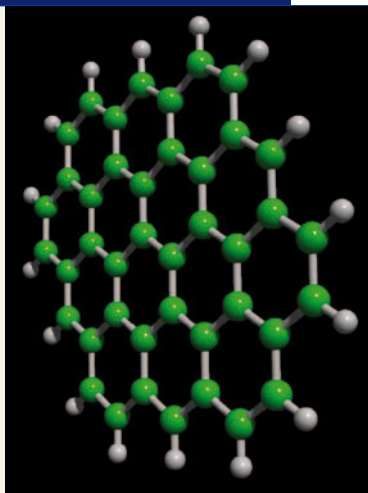
Um der Frage nachzugehen, ob PAK-Moleküle tatsächlich die Ursache für die DIBs sind, haben wir in unserer Gruppe ein entsprechendes Forschungsprogramm initiiert. Die benötigten Proben – sofern nicht kommerziell erhältlich – wurden im eigenen Labor unter astrophysikalisch relevanten Bedingungen hergestellt (Infokasten „Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe“) oder von Chemikern synthetisiert.

Die PAK-Moleküle sollten idealerweise in der Gasphase und bei Temperaturen unterhalb 50 K spektroskopiert werden. Dies ist mit der Molekularstrahl-technik möglich (Infokasten „Spektroskopie an kalten Molekülen“). Leider ist diese Technik zeitaufwändig und erfordert viel Probenmaterial. Sie eignet sich deshalb nicht für große PAKs, die nur in geringen Mengen zur Verfügung stehen. Hier bietet die Matrix-Isolationsspektroskopie (MIS, s. Infokasten) in Neon eine bewährte Alternative. Sie liefert in relativ kurzer Zeit Absorptionsspektren über einen großen Spektralbereich. Allerdings sind die Banden wegen der Wechselwirkung in der Matrix stark verbreitert und verschoben, was einen direkten Vergleich mit astrophysikalischen Beobachtungen ausschließt. Wird die Spektroskopie

### POLYZYKLISCHE AROMATISCHE KOHLENWASSERSTOFFE

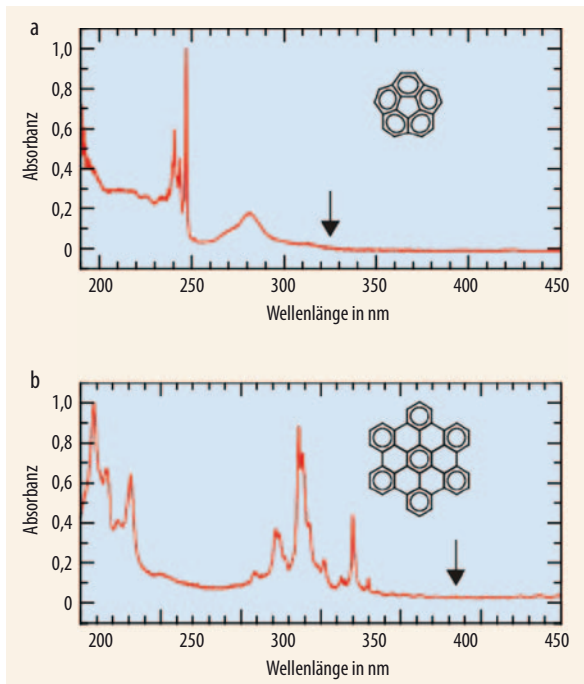
Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAKs) sind flächige Kohlenstoffmoleküle, die wir uns als nanoskalige Bruchstücke von Graphen vorstellen können, deren Randatome mit Wasserstoff abgesättigt sind. Sie lassen sich nasschemisch herstellen, entstehen aber auch durch Verbrennung, z. B. im Dieselmotor.

Die im Weltraum vermuteten interstellaren PAKs sind durch Gasphasenkondensation in den Hüllen kohlenstoffreicher, alter, entwickelter Sterne entstanden. Die Laserpyrolyse erlaubt es, ihre Entstehung im Labor zu simulieren. Dazu wird die Strahlung eines Infrarotlasers in eine Reaktorzelle fokussiert, durch die Kohlenwasserstoffgas strömt. Für die Wellenlängen eines  $\text{CO}_2$ -Lasers bietet sich Ethen ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ) an, das die Laserstrahlung direkt absorbiert. Multiphotonenanregung heizt die Moleküle anschließend auf, bis sie dissoziieren (Pyrolyse). So entsteht aus den Molekülbruchstücken ein übersättigter Dampf, der abkühlt und zu größeren Molekülen, Clustern und Nanoteilchen kondensiert.



Das PAK  $\text{C}_{42}\text{H}_{16}$

Je nach Laserleistung und damit erreichter Temperatur können Fullerene entstehen (über 1700 K), Rußteilchen mit einem hohen PAK-Anteil oder sogar ausschließlich PAK-Moleküle (um 1000 K). Die Pyrolyseprodukte werden in geeigneten Filtern aufgefangen, mit organischen Lösungsmitteln herausgewaschen und von den nichtlöslichen Rußteilchen getrennt [4].



**Abb. 3** Normierte Absorptionsspektren von Corannulen (a) und Hexabenzocoronen (b), die bei 6 K in einer Ne-Matrix isoliert wurden. Die Pfeile kennzeichnen die Positionen der jeweiligen vibrationslosen  $S_0 \leftarrow S_1$ -Übergänge, die bei diesen Molekülen aus Symmetriegründen verboten sind.

statt in einer Ne-Matrix hingegen in supraflüssigen He-Tröpfchen durchgeführt, so ist die Wechselwirkung der Moleküle mit der Umgebung wegen deren geringerer Polarisierbarkeit wesentlich schwächer. Die Absorptionsbanden in der Gasphase lassen sich gut abschätzen, wenn man die Spektren in verschiedenen Matrixmaterialien misst und eine Extrapolation zu verschwindender Polarisierbarkeit durchführt. In den meisten Fällen kann man dann schon entscheiden, ob das untersuchte Molekül als Träger einer diffusen interstellaren Bande infrage kommt oder nicht. Nur bei einer vielversprechenden Übereinstimmung werden zur endgültigen Klärung Experimente im Molekularstrahl angesetzt.

### Spektren aus dem Labor ...

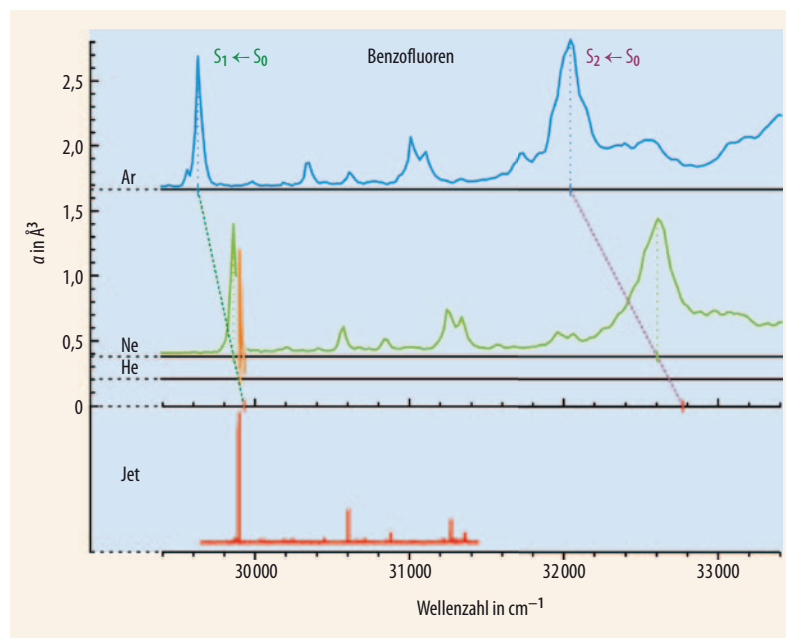
Der überwiegende Teil der DIBs liegt in einem Spektralbereich, in dem elektronische Übergänge für die Absorption verantwortlich sind. Wir haben uns auf den UV- und sichtbaren Bereich konzentriert, da die kleineren Moleküle hier sehr gut absorbieren und erst die sehr großen PAKs elektronische Übergänge im Infraroten haben. Zudem standen uns für diesen Spektralbereich die abstimmbaren Laser und Nachweistekniken zur Verfügung.

**Abb. 2** zeigt ein typisches elektronisches Anregungsspektrum von Perylen, gemessen im Molekularstrahl bei einer Rotationstemperatur von etwa 10 K mithilfe der CRDS-Methode (Infokasten „Spektroskopie ...“). Neben der vibrationslosen Ursprungsbande treten fast immer auch weitere Banden bei höheren Energien auf,

die einer Anregung in höhere Schwingungszustände desselben elektronischen Zustands entsprechen. Zusätzlich gibt es bei noch kürzeren Wellenlängen in der Regel Übergänge in höher angeregte elektronische Zustände, die wiederum eine ähnliche Struktur aufweisen. Daher ist ein Molekül wie Perylen nur dann in einem astrophysikalischen Objekt zweifelsfrei nachgewiesen, wenn dessen Spektrum alle Banden mit den hier gezeigten Intensitätsverhältnissen enthält.

Als Ursache einer DIB kommt Perylen nicht in Frage, da die beobachteten DIBs alle breiter sind und bei größeren Wellenlängen auftreten. Diesen Spektralbereich bevölkern nur größere PAKs, da generell die Anregungsenergie für den ersten elektronischen Übergang bzw. die Bandlücke von PAKs mit wachsender Größe abnimmt. Wie Modellrechnungen zeigen, sind größere PAKs bessere Kandidaten, denn nur ab ca. 40 bis 50 C-Atomen sind sie stabil genug, um in den vorherrschenden Strahlungsfeldern zu überleben [3].

Damit besteht das nächste Ziel für die Laborastrophysik darin, große PAKs spektroskopisch zu charakterisieren. Da größere Vertreter als das Coronen in der Regel nicht kommerziell erhältlich sind, benötigen wir hierzu die Hilfe von Kooperationspartnern aus der präparativen organischen Chemie. Leider ist die Molekularstrahltechnik zu material- und zeitaufwändig, sodass wir auf die Matrix-Isolationsspektroskopie (MIS) ausweichen mussten. **Abb. 3** zeigt als Beispiel die Absorptionsspektren der beiden astrophysikalisch relevanten PAKs Corannulen und Hexabenzocoronen (HBC), gemessen in einer Ne-Matrix bei 6 K. Wäh-



**Abb. 4** Absorptionsspektren von 2,3-Benzofluoren, gemessen in einer Argon- (blau) und Neon-Matrix (grün), in Heliumtröpfchen (orange) und in der Gasphase (rot). Die Spektren sind so übereinander angeordnet, dass ihre Nulllinien die y-Achse auf der Höhe der jeweiligen Polarisierbarkeit  $\alpha$  schneiden. Verbindet man die Positionen der Ur-

sprungsbande für den  $S_1 \leftarrow S_0$ -Übergang (dunkelgrün gestrichelt), so wird die x-Achse auf der Höhe von  $\alpha = 0$  bei dem kleinen roten Balken geschnitten, der somit das Ergebnis der Extrapolation für die Gasphase markiert ( $29\,933\text{ cm}^{-1}$ ). Dies stimmt sehr gut mit dem tatsächlich in der Gasphase gemessenen Wert überein.

rend das Corannulen als Bestandteil und Vorläufer des Fulleren-Moleküls  $C_{60}$  gilt, ist HBC besonders stabil, sodass es auch bei hoher Strahlungsdichte überlebensfähig ist. Im Vergleich zu dem in der Gasphase gemessenen Spektrum von Perylen fällt auf, dass die Vibrationsbanden stark verbreitert sind. Zusätzlich sind alle Banden rotverschoben, was allerdings nicht direkt zu sehen ist.

... und ihre Auswertung

Die Verschiebung einer Vibrationsbande in einem bestimmten elektronischen Zustand korreliert im Wesentlichen mit der Polarisierbarkeit  $\alpha$  des Edelgases, in das das PAK-Molekül eingelagert wurde. Liegen MIS-Messungen für zwei Matrixmaterialien vor, sagen wir Argon und Neon, so kann man die Gasphasenposition in guter Näherung mithilfe einer linearen Extrapolation entsprechend der Formel  $\nu_{\text{gas}} = \nu_{\text{Ne}} + f_{\alpha} (\nu_{\text{Ne}} - \nu_{\text{Ar}})$  berechnen [6, 7]. Dabei hängt der Faktor  $f_{\alpha} = (\alpha_{\text{Ar}}/\alpha_{\text{Ne}} - 1)^{-1} \approx 0,32$  allein von den Polarisierbarkeiten von Ar und Ne ab. Abb. 4 verdeutlicht das Verfahren anhand der Absorptionsspektren von 2,3-Benzofluoren. Der Vergleich mit dem tatsächlich in der Gasphase gemessenen Spektrum zeigt, dass das extrapolierte Matrixspektrum um weniger als  $40 \text{ cm}^{-1}$  abweicht – eine sehr gute Näherung. Wir haben diese Methode für insgesamt sechs PAKs überprüft und

gezeigt, dass die Ungenauigkeit kleiner als  $50 \text{ cm}^{-1}$  ist. Das entspricht  $0,6 \text{ nm}$  bei  $350 \text{ nm}$  [7].

Die Verschiebung der Absorptionsbande hängt nicht nur von der Polarisierbarkeit des Matrixmaterials ab, sondern auch von der Polarisierbarkeit des eingebetteten Moleküls. Das zeigt z. B. die größere Matrixverschiebung der  $S_2 \leftarrow S_0$ -Banden (Abb. 4). Außerdem hängt auch die Bandenbreite von der Polarisierbarkeit ab. So nimmt die Breite der Ursprungsbande des  $S_1 \leftarrow S_0$ -Übergangs von Ar als Matrixmaterial über Ne zu He deutlich ab. Generell kommt das in Helium-Tröpfchen gemessene Absorptionsspektrum dem Gasphasenspektrum schon sehr nahe. Deswegen eignen sich Helium-Tröpfchen hier als ideales Matrixmaterial.

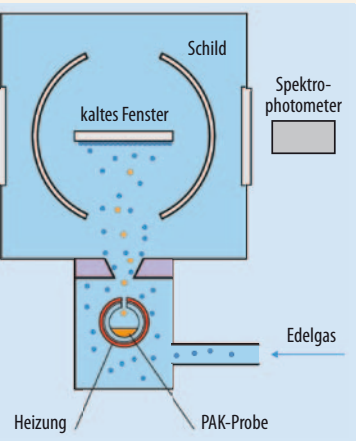
Die in verschiedenen Matrixmaterialien gemessenen Absorptionsspektren erlauben bereits sehr gute Vorhersagen für die Positionen der PAK-Banden in der Gasphase. Bisher hat das vollkommen ausgereicht, um die betreffenden PAKs als Ursache einer diffusen Bande auszuschließen. Falls künftig einmal die Extrapolation der Matrixdaten auf eine mögliche Koinzidenz mit einer DIB hinweisen sollte, so wäre es für eine endgültige Bestätigung jedoch unerlässlich, das entsprechende Spektrum auch in der Gasphase (bei tiefen Temperaturen) zu messen.

Auch wenn Laborexperimente zeigen sollten, dass ein bestimmtes PAK-Molekül für keine der bekannten DIBs infrage kommt, so möchte man dennoch eine obere Grenze für die Molekülkonzentration in der

Spektroskopie an kalten Molekülen

Laserspektroskopie in der Expansion eines Düsenstrahls

Am besten lassen sich Moleküle mit der Überschallexpansion abkühlen. Dazu werden sie mit einem Trägergas (meist He oder Ar) gemischt und durch eine Düse in eine Vakuumapparatur expandiert, in der sie bereits nach wenigen Millimetern eine Temperatur um  $10 \text{ K}$  annehmen. Zunächst müssen die PAK-Moleküle jedoch in die Gasphase gebracht werden, wozu man die Probe in einem kleinen Reservoir vor der Düse auf bis zu  $500 \text{ }^\circ\text{C}$  heizt oder die Laserverdampfung einsetzt. Zur Absorptionsspektroskopie im expandierten Düsenstrahl eignet sich die Cavity Ring-Down Laser Spectroscopy (CRDS). Bei dieser hochempfindlichen Lasertechnik misst man die Abklingzeit eines abstimmbaren gepulsten Laserstrahls, der innerhalb eines Resonators hoher Güte viele Male hin- und herläuft. Enthält der Resonator ein absorbierendes Medium (hier: die kalten PAK-Moleküle), so verkürzt sich die Abklingzeit des Laserpulses. Die reziproke Abklingzeit korreliert linear mit dem Absorptionsquerschnitt der PAK-Moleküle.



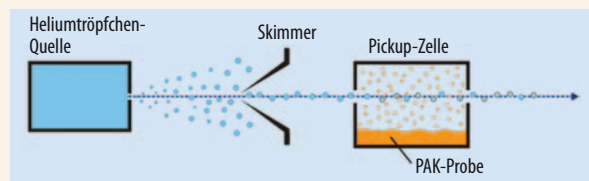
Matrix-Isolationsspektroskopie (MIS)

Bei dieser Methode werden die PAK-Moleküle zusammen mit einem Edelgas (idealerweise Neon) auf einem kalten Fenster ( $T = 6,5 \text{ K}$ ) niedergeschlagen (Abb. links). Da der Anteil der PAK-Moleküle nur  $1 - 5\%$  beträgt, werden sie isoliert voneinander in die Edelgasmatrix eingebaut. Nach der Präparation wird die Probe zusammen mit dem Kälteschild um  $90^\circ$  gedreht,

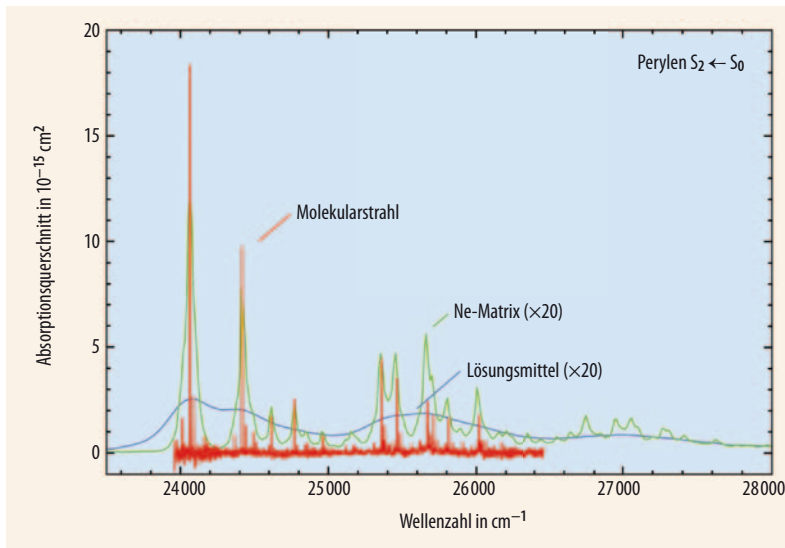
und dann lassen sich mithilfe eines kommerziellen Spektrophotometers die Absorptionsspektren messen. Die MIS kann mit einer einzigen Messung einen großen Spektralbereich erfassen und benötigt nur sehr wenig Probenmaterial. Allerdings sind die Absorptionsbanden durch die Wechselwirkung der PAK-Moleküle mit der Matrix verschoben.

Spektroskopie in ultrakalten supraflüssigen Heliumtröpfchen

Die Wechselwirkung lässt sich minimieren, wenn man statt Neon Helium verwendet, das sich durch eine geringere Polarisierbarkeit aus-



zeichnet. Da Helium jedoch unter Vakuumbedingungen flüssig ist, eignet sich die traditionelle MIS-Methode nicht. Einen Ausweg bietet die Düsenstrahl-Technik, welche die starke Abkühlung bei der Expansion ins Vakuum ausnutzt, um ultrakalte Heliumtröpfchen zu erzeugen, die als Molekularstrahl frei propagieren (Abb. oben). Durchquert dieser Molekularstrahl eine Pickup-Zelle, in der sich die zu untersuchenden Moleküle bei niedrigem Druck ( $\text{ca. } 10^{-6} - 10^{-5} \text{ mbar}$ ) befinden, nehmen die Heliumtröpfchen die Moleküle in ihr Inneres auf, wo sie eine Temperatur von  $0,37 \text{ K}$  annehmen. Die von den Tröpfchen weiter transportierten Moleküle können mit einem Massenspektrometer detektiert werden. Absorptionsspektroskopie ist möglich, indem man den Strahl dotierter Heliumtröpfchen mit einem abstimmbaren Laserstrahl kreuzt. Über die Spektroskopie hinaus lassen sich mit dieser Methode auch sehr vorteilhaft astrochemische Reaktionen untersuchen [5].



**Abb. 5** Absorptionsspektren für den ersten elektronischen Übergang von Perylen in verschiedenen Umgebungen: Lösungsmittel (Cyclohexan) bei 300 K (blau), Ne-Matrix bei 6,5 K (grün) und Vakuum (Molekularstrahl) bei etwa 10 K (rot). Die Spektren in der Matrix und im Lösungsmittel sind um 177 bzw. 1130  $\text{cm}^{-1}$  blauverschoben, um die Matrixverschiebung auszugleichen. Während das Lösungsmittelspektrum in absoluten Intensitäten gemessen wurde, wurde die integrale Intensität des Ne-Spektrums davon übernommen. Schließlich lassen sich die einzelnen schmalen Absorptionsbanden des unverschobenen Molekularstrahlspektrums an den Banden des Ne-Matrixspektrums kalibrieren.

jeweiligen astrophysikalischen Umgebung angeben. Dazu müssen die absoluten Absorptionsquerschnitte dieses Moleküls bekannt sein. Da absolute Messungen in Molekularstrahlen nur sehr aufwändig und schwierig sind, haben wir ein Verfahren entwickelt, das wiederum die Matrixspektroskopie in Neon nutzt.

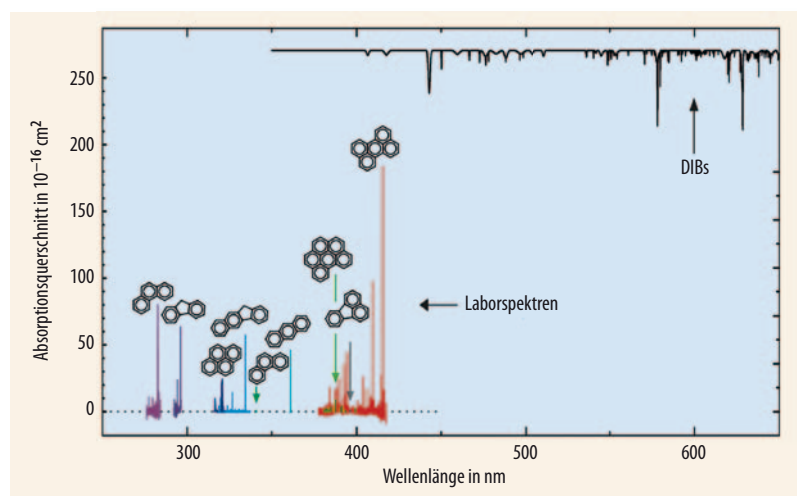
Es beruht darauf, zunächst das gesamte Absorptionsspektrum des PAK-Moleküls in einem Lösungsmittel zu messen, in dem es sich vollständig löst. Bei genauer Kenntnis der Konzentration lassen sich die Absorptionsquerschnitte direkt quantitativ angeben. Leider sind die Absorptionsbanden in dem Lösungsmittel noch viel stärker verbreitert als in der Edelgasmatrix, sodass sich die Banden des Gasphasenspektrums nicht zuordnen lassen. Hier kann das Neon-Matrixspektrum wertvolle Dienste bei der Zuordnung leisten. Unter der Annahme, der über einen kompletten elektronischen Übergang integrierte Absorptionsquerschnitt sei unabhängig von der Matrix oder dem Lösungsmittel – was mit guter Näherung erfüllt ist –, lassen sich zunächst durch Vergleich mit dem Lösungsmittelspektrum den Banden im Neon-Matrixspektrum absolute Querschnitte zuordnen. Danach ist es ein Leichtes, die gemessenen Banden im Neon-Matrixspektrum zu finden und ihre Intensitäten gleichzusetzen, wie das Beispiel von Perylen zeigt (Abb. 5) [6, 7].

### Vergleich mit astrophysikalischen Daten

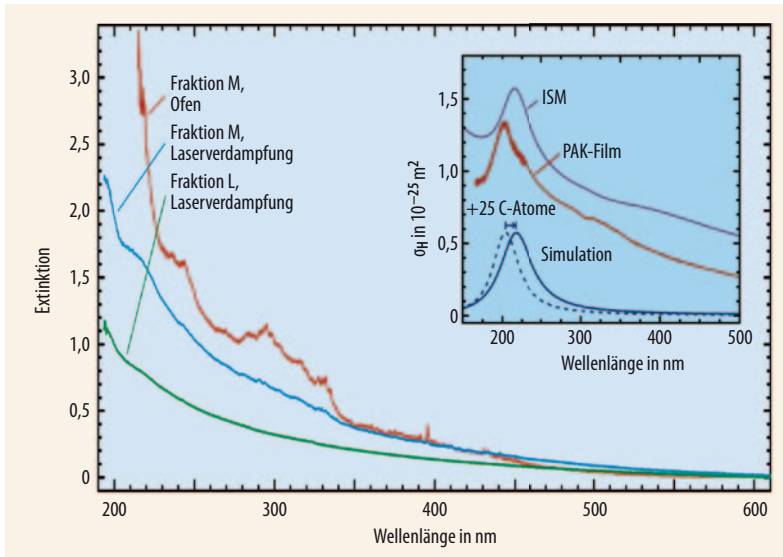
Während die im Labor in einem kalten Molekularstrahl gemessenen elektronischen Spektren von acht verschiedenen PAKs wegen der geringen Größe der PAKs alle im kurzwelligen sichtbaren Bereich bzw. im nahen UV liegen, sind die prominenten DIBs aus astrophysikalischen Beobachtungen erst oberhalb von 400 nm zu beobachten (Abb. 6). In dem Bereich, in dem sich beide Spektren überlappen, gibt es noch keine Koinzidenzen. Für weiterreichende Aussagen sind sowohl genauere Beobachtungen unterhalb von 400 nm nötig als auch Labormessungen von größeren PAKs mit elektronischen Übergängen oberhalb von 400 nm.

Unter Federführung des MPIs für Astronomie wurden hochauflösende UV-Beobachtungen am Very Large Telescope (VLT) in Chile durchgeführt, bei Wellenlängen zwischen 305 bis 385 nm, bei denen vieler im Labor untersuchten PAKs absorbieren. Trotz der hohen Qualität der Beobachtungen gelang es nicht, neue Koinzidenzen aufzudecken [6]. Allerdings konnten wir mithilfe der absoluten Absorptionsquerschnitte obere Grenzen für das Vorkommen der acht im Labor untersuchten Moleküle in den beobachteten astrophysikalischen Umgebungen ermitteln. Mit Werten von  $(1 - 1,4) \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  ließen sich die Säulendichten der PAKs Phenanthren, Pyren und Perylen am stärksten einschränken.

Da es im Labor schwierig ist, Absorptionsspektren von großen PAKs im Molekularstrahl zu messen, mussten wir auf die Matrixspektroskopie zurückgreifen. Das größte isoliert untersuchte Molekül war das als besonders stabil eingestufte Hexabenzocoronen mit 42 Kohlenstoffatomen (s. Abb. 3). Mit dem zuvor beschriebenen Extrapolationsverfahren wurde die Position einer sehr starken Bande, die das Ne-Matrixspektrum dominiert, für die Gasphase bei 334,4 nm bestimmt. Eine entspre-



**Abb. 6** Kalibrierte Absorptionsspektren von PAKs, die im Molekularstrahl mit der CRDS-Methode gemessen wurden (unten), im Vergleich mit dem synthetischen DIB-Spektrum von Jenniskens und Désert (oben) [2].



**Abb. 7** In einer Ne-Matrix gemessene Laborspektren unterschiedlicher Fraktionen einer PAK-Probe. Die Fraktion L enthält große PAKs mit mehr als 10 Ringen, die Fraktion M mittlere mit 7 bis 9 Ringen; bei beiden wurde Laserverdampfung angewendet. Im Gegensatz dazu weist das Spektrum der im Ofen verdampften

Fraktion M noch deutliche Strukturen auf, da die Matrix noch viele kleine PAKs enthält. Das Inset zeigt einen Vergleich zwischen der interstellaren UV-Absorptionsbande bei 217,5 nm (ISM) und dem Laborspektrum eines PAK-Films sowie eine Rechnung, die die Anhebung der mittleren PAK-Größe simuliert [9].

chende Absorption taucht in den astrophysikalischen Spektren allerdings nicht auf [6].

### Hin zu größeren PAKs

Mithilfe der Laserpyrolyse ist es uns gelungen, im Labor die Synthese großer PAKs in den kohlenstoffreichen Hüllen entwickelter Sterne zu simulieren (Infokasten „Polyzyklische ...“). Das Szenario läuft unter Bedingungen ab, wie sie in den Hüllen entwickelter Sterne (AGB-Sterne) vorherrschen. Wie wir es auch von den astrophysikalischen Objekten erwarten, enthalten die Laborproben eine breite Verteilung von PAKs unterschiedlicher Größe und Struktur. Diese lässt sich mit chromatographischen Methoden analysieren und in Fraktionen unterschiedlicher Größe aufteilen, die dann per Matrixspektroskopie charakterisiert werden. Dabei erlaubt es die Laserverdampfung, möglichst alle in der Probe enthaltenen PAKs unabhängig von ihrem Dampfdruck in die Matrix zu überführen. Die Absorptionsspektren zweier Fraktionen mit mittleren bzw. großen PAK sind weitgehend strukturlos (Abb. 7), da die große Vielfalt der mit der Laserverdampfung in die Matrix eingebrachten PAKs dazu geführt hat, dass sich die zahlreichen Absorptionsbanden gegenseitig auslöschen [8]. Wenn in astrophysikalischen Objekten ähnlich vielfältige PAKs vorkommen wie in unseren Laborproben, werden wir auch dort keine isolierten Absorptionsbanden wie die DIBs beobachten können.

Wie wir andererseits zeigen konnten, tragen PAKs zu einem anderen astrophysikalischen Phänomen signifikant bei, nämlich zur eingangs erwähnten UV-

Bande bei 217,5 nm. Wie das Inset in Abb. 7 zeigt, ähnelt das Absorptionsspektrum eines mithilfe der Laserverdampfung aus den Pyrolyseprodukten erzeugten PAK-Films sehr stark der mittleren interstellaren Extinktionskurve. Ferner zeigen unsere quantenchemischen Rechnungen, dass eine Verschiebung der Größenverteilung um circa 25 C-Atome zu größeren PAKs hin zu einer recht guten Übereinstimmung mit der Beobachtung führt [9].

### Fazit

Die Laboruntersuchungen legen nahe, dass astrophysikalische Prozesse die Herstellung von PAK-Mischungen mit breiter Verteilung zu bevorzugen scheinen. Die Vielzahl der damit auftretenden Absorptionsbanden sollte – wie im Labor – zu verbreiterten und strukturlosen Spektren führen. Demnach können die DIBs nicht von normalen (neutralen, einfach gesättigten und nicht-funktionalisierten) PAKs herrühren, es sei denn, es gibt einen Selektionsmechanismus, der nur bestimmte PAKs mit besonderen Eigenschaften (z. B. besonders hoher Stabilität) auswählt. Andererseits machen die Laborexperimente deutlich, dass zu größeren Aggregaten kondensierte PAKs einen wesentlichen Beitrag zur interstellaren Extinktionskurve leisten können.

### Literatur

- [1] M. L. Heger, Lick Obs. Bull. **10**, 146 (1922)
- [2] P. Jenniskens und F.-X. Désert, Astron. Astrophys. Suppl. Ser. **106**, 39 (1994)
- [3] A. G. G. M. Tielens, Annu. Rev. Astron. Astrophys. **46**, 289 (2008)
- [4] C. Jäger et al., Astrophys. J. Suppl. Ser. **166**, 557 (2006)
- [5] S. A. Krasnokutski und F. Huisken, J. Phys. Chem. A **115**, 7120 (2011)
- [6] R. Gredel et al., Astron. Astrophys. **530**, A26 (2011)
- [7] Y. Carpentier et al., in: Modern Concepts in Laboratory Astrochemistry, S. Schlemmer, H. Mutschke und Th. Giesen (Hrsg.), WILEY-VCH, Weinheim (2014)
- [8] M. Steglich et al., Astron. Astrophys. **540**, A110 (2012)
- [9] M. Steglich et al., Astrophys. J. **712**, L16 (2010)

### DIE AUTOREN

**Friedrich Huisken** (FV Molekülphysik) studierte Physik in Göttingen und promovierte am MPI für Strömungsforschung, wo er nach einem Postdoc-Aufenthalt bei Y. T. Lee in Berkeley Gruppenleiter wurde. Er wechselte 2003 ans MPI für Astronomie und baute die gemeinsame Laborastrophysikgruppe an der Uni Jena auf, deren Leitung er bis 2011 innehatte. Seit 2003 ist er apl. Professor an der FSU.



**Cornelia Jäger** hat in Jena Chemie studiert und war zunächst für das Jenaer Glaswerk tätig. 1992 kam sie zur Max-Planck-Arbeitsgruppe „Staub in Sternentstehungsgebieten“ an die FSU, forschte seit 2006 in der Jenaer Laborastrophysikgruppe u.a. über polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe und übernahm 2012 die Gruppenleitung.

