

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ АСТРОНОМИИ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Кочина Ольга Валерьевна

ДИАГНОСТИКА ФИЗИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ
В ОБЛАСТЯХ ЗВЕЗДООБРАЗОВАНИЯ
ПРИ ПОМОЩИ ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

01.03.02 — астрофизика и звездная астрономия

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д.ф.-м.н. Д.З. Вибе

Москва – 2017

Оглавление

Введение	4
1 Физико-химическое моделирование протозвездных объектов	19
1.1 Химическая эволюция протозвездных объектов	19
1.1.1 Основные принципы астрохимического моделирования	20
1.2 Модель протозвездного объекта	24
1.3 ТМС-1: Моделирование области образования звезд малой массы	26
1.4 DR21(OH)M — сложные молекулы в массивном протозвездном объекте	31
1.5 Обсуждение и выводы	40
1.6 Положения, выносимые на защиту	43
2 Возможности диагностики эволюционных стадий протозвездного объекта по наблюдениям сложных молекул	45
2.1 Модель химической эволюции протозвездного объекта, учитывающая прогрев и коллапс	46
2.2 Результаты	48
2.3 Моделирование интенсивностей линий	54
2.4 Обсуждение и выводы	57
2.5 Положения, выносимые на защиту	60
3 Пылинки различных размеров и химическая эволюция протозвездных объектов	61

3.1	Химические процессы на пылинках	61
3.2	Модель протозвездного объекта	65
3.3	Результаты	67
3.4	Обсуждение и выводы	80
3.5	Положения, выносимые на защиту	82
4	Возможности диагностики элементного состава протозвездных объектов	84
4.1	Элементный состав областей звездообразования	84
4.2	Модель протозвездного объекта	88
4.2.1	Начальный химический состав	90
4.3	Результаты	93
4.3.1	Дейтерированные соединения	97
4.3.2	Индикаторы молекулярного водорода	102
4.4	Моделирование линий	106
4.5	Обсуждение и выводы	108
4.6	Положения, выносимые на защиту	109
	Заключение	110
	Литература	112

Введение

Звездообразование — важный и активно исследуемый процесс. Звезды рождаются в плотных молекулярных облаках, в которых вследствие возникновения гравитационной неустойчивости начинается активный процесс коллапса, приводящий к образованию плотного ядра, где впоследствии может развиться будущая звезда. Однако исследователи ранних стадий звездообразования сталкиваются с рядом трудностей, основная из которых состоит в невозможности непосредственно наблюдать процессы, происходящие в облаке. Это связано с тем, что основным компонентом областей звездообразования является молекулярный водород, который в условиях плотных и холодных молекулярных облаков не излучает. Таким образом, основная масса вещества оказывается невидимой. Если вещество невозможно увидеть непосредственно, возникает вопрос, что можно использовать в качестве индикатора его наличия?

Первым самым очевидным кандидатом на роль индикатора является пыль, присутствующая в облаке в достаточном количестве и излучающая в континууме, тем более, что пыль и газ в облаках хорошо перемешаны. Однако по излучению пыли невозможно определить температуру газа. Также недоступна информация о движении вещества, а значит и происходящих в нем процессах коллапса и аккреции. Кроме того, оценка физических условий по излучению пыли требует ряда предположений об оптических свойствах пылинок и их химическом составе, определение которых само по себе является отдельной задачей. Таким образом пыль оказывается недостаточно хорошим источником информации, и приходится искать другие индикаторы.

Такой успешной альтернативой пыли оказались молекулы. Молекулы

излучают в линиях, а значит позволяют получить информацию о движении вещества, основываясь на их доплеровском сдвиге. Также излучение в линиях несет информацию о температуре газа. Примером индикатора температуры является аммиак. Из-за того что переходы между вращательными уровнями с одинаковыми значениями квантовых чисел являются метастабильными, время жизни на них превышает время между столкновениями. Поэтому состояние возбуждения отдельной молекулы аммиака определяется в основном столкновениями, а температура возбуждения молекул несет информацию о кинетической температуре газа. Однако в отличие от пыли молекулы не перемешаны с газом равномерно, у каждой из них имеется свое распределение, определяемое химическими процессами. Астрохимия, или космохимия, занимается тем, что объясняет подобные особенности и этим делает молекулы более удобными кандидатами на роль инструмента для диагностики состояния облака.

Одним из основных современных методов исследования химического состава межзвездной и околозвездной среды являются спектральные обзоры, то есть, получение спектра высокого разрешения для заданного направления в относительно широком диапазоне частот. Спектральный обзор позволяет наблюдать одновременно большое количество линий, принадлежащих десяткам молекул, включая как простые, так и сложные соединения. Спектральные обзоры являются не только источником информации о молекулярном составе исследуемого объекта, но и удобным инструментом для тестирования химических моделей. Полученные из спектральных обзоров интенсивности линий пересчитываются в содержания компонентов, которые можно сравнить с результатами астрохимического расчета. При этом развитие техники приводит к повышению чувствительности наблюдательных инструментов. Появляется возможность наблюдения линий, ранее бывших слишком слабыми. Идентифицируются новые молекулы; появляется интерес к сложным и нестандартным молекулам. Все это стимулирует

развитие астрохимического подхода.

К сожалению, обратной стороной высокого спектрального разрешения оказывается, как правило, низкое угловое разрешение и (или) возможность изучения единственной позиции в направлении на исследуемый объект. Это вынуждает при анализе спектральных обзоров с особой тщательностью подходить к подбору физических условий, наилучшим образом описывающих исследуемый объект.

В настоящее время для моделирования областей звездообразования используются данные, полученные как с наземных, так и с космических телескопов, таких как ALMA (Атакамская Большая Миллиметровая/Субмиллиметровая Решётка) или космических телескопов Гершель и Спитцер. И хотя Гершель уже завершил свою работу, однако полученных им данных, в совокупности с данными Спитцера, накоплено достаточно, чтобы еще на многие годы обеспечивать исследователей материалом для обработки и моделирования. В частности, использование этих данных позволяет восстанавливать распределение плотности и поля излучения в изучаемых объектах. В целом, к построению модели объекта приходится подходить с двух сторон, при помощи модели химической эволюции подбирая такие физические условия, чтобы смоделированные содержания компонент максимально соответствовали полученным наблюдениям.

Для моделирования химической эволюции необходимы физическая модель, база данных с коэффициентами скоростей астрохимических реакций, математическое представление сетки химических реакций в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) и программа для решения системы ОДУ.

Физические модели, используемые для химического моделирования, имеют различную степень сложности. Развитие вычислительной техники стимулирует разработку максимально реалистичных моделей, в которых химические процессы моделируются одновременно и согласованно с трех-

мерной газодинамикой и переносом излучения. Однако практика исследования протозвездных объектов свидетельствует, что усложнение физической постановки задачи не всегда приводит к лучшему описанию результатов наблюдений. В общем случае, степень сложности физической модели выбирается в соответствии с целями и задачами конкретного исследования.

Первоначально в связи с ограниченными техническими возможностями для моделирования процессов химической эволюции использовались одноточечные модели [1, 2], предполагающие усреднение физических условий в различных областях облака, но, тем не менее, успешно воспроизводившие наблюдаемый химический состав. Успешной здесь и далее мы будем считать модель, в которой предсказанные содержания (относительные содержания, объемные концентрации, лучевые концентрации) большинства компонентов отличаются от наблюдаемых значений не более чем на порядок. Это условие может показаться нестрогим, однако, принимая во внимание сложности наблюдений, неопределенности перевода интенсивностей наблюдаемых линий в лучевые концентрации, а также значительный диапазон содержаний различных компонентов, это условие представляется оправданным [3, 4]. Примером подобных исследований является работа [2], в которой путем числового моделирования был воспроизведен полученный из наблюдений химический состав области звездообразования ТМС-1, а также оценен химический возраст региона. В дальнейшем получили развитие многоточечные одномерные модели [5–7], также успешно воспроизводившие наблюдаемые содержания.

Усложнение модели проявляется не только в учете различных физических условий в различных областях облака, а также в учете эволюции этих условий. Самыми простыми моделями с этой точки зрения можно считать псевдо-эволюционные [5, 8, 9], в которых эволюционирует только химический состав, а физические условия, например, поле излучения, плотность и температура, остаются неизменными. В эволюционных же моделях физи-

ческие параметры меняются со временем. Самым очевидным усложнением с целью приближения к реальным процессам, происходящим в звездообразующем облаке, является учет коллапса [10–14], то есть изменение распределения плотности и прогрев облака протозвездой [13, 15, 16]. Существуют и более сложные модели, учитывающие динамику [12, 17, 18].

В последнее время благодаря существенному развитию вычислительной техники появляется все больше работ, посвященных двух- и трехмерному моделированию областей звездообразования и отдельных протозвездных объектов с учетом химических реакций [17, 19–22]. Эти модели весьма сложны в разработке и требуют очень существенных вычислительных ресурсов, поэтому с их помощью удается пока моделировать эволюцию лишь простых молекул. Однако, с другой стороны, одновременно возрастает и интерес к наблюдениям и моделированию более сложных органических молекул. Модели, в которых учитывалось бы большое количество химических компонентов и реакций между ними, пока решаются в весьма упрощенной физической постановке, либо одномерной, либо даже одноточечной [16, 23, 24]. При этом подобные модели оказываются довольно успешными с точки зрения объяснения лучевых концентраций многих молекул, в том числе, и довольно сложных, в различных по физическим параметрам областях звездообразования. В качестве примера успешной одноточечной модели можно привести модель, представленную в работе Васюниной и др. [16]. В этой работе одноточечная химическая модель позволила успешно воспроизвести содержания ряда сложных соединений, полученных авторами в результате наблюдений инфракрасного темного облака IRDC028.34+0.06. Модификации одноточечной модели, используемые в работе Васюниной и др., включали как псевдо-эволюционную, с неизменными состояниями физических параметров, так и эволюционную, в которой учитывалось изменение температуры за счет прогрева облака излучением звезды, следующим за холодной стадией в которой температура оставалась

неизменной.

В данной диссертационной работе соискателем был поставлен ряд целей, достижение которых позволит развить различные аспекты астрохимического моделирования.

Цели диссертационной работы

1. Разработка и тестирование методики, позволяющей моделировать химическую эволюцию сложных молекул в процессе образования звезд в различных условиях и для различных объектов.
2. Выявление сложных молекул, чувствительных к коллапсу и прогреву в процессе эволюции протозвездного объекта.
3. Исследование влияния размера пылинок на химическую эволюцию протозвездного объекта.
4. Выявление молекул, обладающих высоким диагностическим потенциалом для определения элементного состава протозвездного объекта.

Задачи

1. Разработка и программная реализация многоточечной модели эволюции содержаний химических компонентов.
2. Тестирование методики определения химического возраста облака на основе наблюдений областей звездообразования DR21(OH) и TMC-1.
3. Разработка и реализация модели, учитывающей тепловую и плотностную эволюцию объекта.
4. Исследование вклада прогрева и коллапса в химическую эволюцию объекта.

5. Разработка и программная реализация модели сложного пылевого состава.
6. Разработка и программная реализация анализатора скоростей реакций.
7. Моделирование химической эволюции областей звездообразования с учетом сложного пылевого состава.
8. Исследование чувствительности химической эволюции к начальному элементному составу области звездообразования.
9. Выявление компонентов, наблюдение которых позволяет получить информацию об элементном составе области звездообразования.

Научная и практическая значимость

В настоящее время астрохимическое моделирование является стандартным подходом к интерпретации спектральных наблюдений как отдельных протозвездных объектов, так и целых областей звездообразования. Однако получение надежных выводов усложняется неопределенностью как внешних, так и внутренних параметров химической модели. Важным критерием адекватности модели и правильности подбора параметров можно считать ее способность одновременно описывать эволюцию как простых двух-трехатомных молекул, так и существенно более сложных соединений. Модель, представленная в исследовании, успешно справляется с поставленной задачей и может эффективно использоваться для диагностики областей звездообразования.

Также важное значение проведенных исследований обеспечивается тем, что в результате проведенной работы из множества молекул, линии которых доступны наблюдениям, выявлены соединения, обладающие максимальным диагностическим потенциалом, наиболее чувствительные к из-

менениям физических условий, либо, напротив, такие, эволюция которых в наименьшей степени зависит от изменений физических условий. В работе даны рекомендации наблюдателям, на каких именно линиях стоит сосредоточить внимание.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Число страниц в диссертации 123, рисунков 27, таблиц 7. Список литературы состоит из 105 наименований.

Во **Введении** обсуждается актуальность темы диссертационной работы, описываются цели и задачи, поставленные перед автором работы, предмет и методология исследований, обсуждается новизна полученных результатов, их научная и практическая значимость. Представлена информация по апробации результатов и научным публикациям по результатам исследований, указан личный вклад соискателя. Приводится краткий обзор содержания диссертации.

Глава 1: Представлены результаты применения метода химического моделирования к областям звездообразования ТМС-1С, хорошо изученной области формирования звезд малой массы, и DR21(OH), области формирования массивных звезд, малоизученной с химической точки зрения. При сравнении результатов расчетов с данными наблюдений проанализированы лучевые концентрации десятков молекул, начиная с простых двухатомных и до сложных органических соединений. Показано, что используемая химическая модель корректно воспроизводит обилия большинства исследованных компонентов. Определены химические возрасты исследуемых областей, причем для DR21(OH) это сделано впервые.

Глава 2: В этой главе исследуется, насколько усложнение моделей приводит к различиям в результатах химического моделирования и каковы границы возможностей химического моделирования по определению эво-

люции физических параметров и текущего состояния протозвездных объектов. Выявлено, что усложнение моделей не вносит существенного вклада в количественное изменение химического состава плотной оболочки вокруг протозвезды. Спустя несколько десятков лет с начала эволюции в облаке устанавливается равновесный химический состав, не чувствительный к изменениям, вносимым усложнениями моделей. Однако несмотря на одинаковые содержания молекул в моделях различных сложностей, существует способ определить физические условия в облаке опираясь на наблюдения спектральных линий. Существуют компоненты, интенсивности линий которых особенно чувствительны к условиям возбуждения даже в холодном облаке. Такие компоненты могут служить индикаторами процессов, происходящих в облаке. Одним из таких индикаторов может являться метанол, что делает наблюдения метанола особо важными для диагностики состояния региона звездообразования.

Глава 3: Космические органические молекулы в значительной степени формируются на поверхности пылинок, потому в астрохимическом моделировании важно правильно учитывать поверхностные процессы. Реальные межзвездные пылинки различаются как по размерам, так и по химическим и физическим параметрам, однако в большинстве моделей рассматриваются пылинки только одного размера и с одинаковой равновесной температурой. В данной главе проводится исследование корректности применения такого подхода: в дополнение к классическим пылевым частицам с радиусом в 0.2 микрон, в расчет было включено принципиальное иное второе население пыли с размером пылинок в 30 ангстрем и более высокой температурой. Было исследовано влияние сложного состава пыли на общую эволюцию молекулярного состава дозвездного ядра и содержание сложных органических соединений. Показано, что различные группы компонентов по-разному реагируют на присутствие мелких пылинок. На ранних стадиях разница определяется преимущественно изменением баланса в

фотопроцессах благодаря эффективному поглощению пылинками второго населения ультрафиолетовых фотонов, а также в столкновительных реакциях с пылевыми частицами. На поздних стадиях вклад в различия также вносит возрастающее доминирование дополнительных каналов реакций.

Глава 4: В данной главе исследована чувствительность ряда особенностей химической эволюции молекулярного облака к элементному химическому составу. Рассмотрено четыре модели — модель с высокой металличностью, эволюция которой протекает исключительно в газовой фазе, две модели с низкой металличностью, процессы в которых протекают как в газовой фазе, так и на поверхности пылинок, а также модель с низкой металличностью и искусственно заниженным содержанием кислорода. Одна из моделей с низкой металличностью изначально содержит только нейтральные компоненты. В другой модели учитывается начальная ионизация атомов тяжелых элементов. Для исследования чувствительности использована сетка химических реакций, включающая подробное описание химии дейтерированных соединений. Показано, что начальный состав так или иначе сказывается на химической эволюции большинства компонентов, но иногда его влияние незначительно. Большее значение имеет включение тех или иных химических факторов, например, поверхностных реакций и деплиции значительной части атомов тяжелых химических элементов в пылинках. Однако имеются компоненты, на которые влияет даже незначительное изменение в начальном и элементном составе. Одним из таких компонентов является ион DCO^+ . Его эволюция чувствительна к начальной степени ионизации атомов тяжелых элементов даже при условии идентичного набора протекающих реакций и сходного элементного состава. Также рассмотрена возможность использования молекул HD и HF в качестве индикаторов наличия молекулярного водорода. Показано, что в рассмотренных физических условиях молекула HF надежно прослеживает наличие молекулы H_2 на временах, превышающих 10^5 лет. Молекула HD при плот-

ностях характерных для протозвездных облаков надежным индикатором H_2 не является.

В **Заключении** суммированы основные результаты работы. Приведены рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы.

Личный вклад соискателя

Соискатель в равной степени с другими соавторами участвовал в постановке задач, разработке методов, их тестировании, проведении расчетов, получении и представлении результатов и выводов.

В частности, соискателем:

1. Модифицирована и улучшена модель химической эволюции протозвездных объектов.
2. Разработан анализатор скоростей реакций.
3. Реализован метод учета прогрева облака протозвездой.
4. На основе имеющихся наблюдений областей звездообразования ТМС-1D и DR21(OH)M определены их химические возрасты, причем для DR21(OH)M это сделано впервые.

Научная новизна

1. Впервые построена 1D-модель, объясняющая содержание большинства сложных молекул в областях образования звезд малой и большой массы.
2. Впервые проанализирован диагностический потенциал наблюдений сложных молекул при оценке физических параметров протозвездных объектов.

3. Впервые эволюция сложных молекул исследована в одномерной модели с различными населенными пылью. Выявлены основные факторы влияния пылинок различных размеров на химическую эволюцию протозвездных объектов.
4. Впервые исследована возможность диагностики элементного состава протозвездных объектов по наблюдениям дейтерированных молекул.

Положения, выносимые на защиту по результатам диссертационной работы

1. Разработана методика анализа эволюции сложных органических соединений в протозвездных объектах. С ее помощью воспроизведены наблюдения десятков молекул в типичных областях образования маломассивных (TMC-1) и массивных (DR21(OH)) звезд. Оценены химические возрасты исследуемых объектов. Показано, что содержание сложных молекул в TMC-1 не требует предположения о нетипичном содержании углерода.
2. Показано, что предполагаемый возраст объекта, определяется не столько простыми, сколько сложными молекулами. По простым молекулам, подобным CO и HCO^+ возраст определить практически невозможно, поскольку их лучевые концентрации со временем практически не меняются.
3. Исследована возможность диагностики длительности различных этапов протозвездной эволюции (коллапса, начального прогрева протозвездой) по наблюдениям сложных органических молекул. Показано, что этап коллапса влияет лишь на самую раннюю эволюцию органических молекул. Различия в лучевых концентрациях между моделями с разной продолжительностью коллапса в период от 100 до 500 тыс. лет для большинства компонентов не превышают предела

точности. Наибольшей чувствительностью к наличию фазы прогрева обладает излучение метанола.

4. Исследована роль пылинок, различающихся размерами, массовой долей и температурой, в химической эволюции протозвездных объектов. Показано, что введение мелких пылинок (с сохранением полной плотности пыли в среде) оказывается некритичным примерно для трети компонентов.
5. Показано, что в областях, граничащих с источниками УФ-излучения, наибольший вклад в различие содержаний вносит эффективное экранирование излучения мелкими пылинками.
6. Продемонстрирована возможность диагностики элементного состава протозвездных объектов по наблюдениям сложных органических и/или дейтерированных молекул. Показано, что наибольшей чувствительностью к элементному составу обладает ион DCO⁺

Апробация

1. Всероссийская конференция “Актуальные проблемы внегалактической астрономии” Пущино, Россия, 19 - 22 апреля 2016.
2. 45-я студенческая научная конференция “Физика Космоса” Коуровка, Россия, 01 - 05 февраля 2016.
3. Конкурс молодых ученых ИНАСАН, 2015.
4. Заседание рабочей группы по теме “Межзвездная среда в галактиках” в рамках конференции “Актуальные проблемы внегалактической астрономии”, Пущино, Россия, 2015.
5. 44-я студенческая научная конференция “Физика Космоса” Коуровка, Россия, 02 - 06 февраля 2015.

6. Конференция-семинар “Физика – космосу”, Байконур, Россия, 25 - 30 октября 2014.
7. Всероссийская астрономическая конференция “Многоликая Вселенная” (ВАК-2013), Санкт-Петербург, Россия, 23-27 сентября 2013.
8. Международный семинар “13th European Workshop on Astrobiology” (EANA’13), Щецин, Польша, 22 - 25 июля 2013.
9. Международная конференция “European Week of Astronomy and Space Science” (EWASS 2012), Рим, Италия, 1 - 6 июля 2012.
10. Международная конференция “Astronomy in the era of information explosion: results and problems”, Москва, Россия, 28 мая - 1 июня 2012
11. Международная конференция “The Warm Universe: Astrochemistry at Intermediate and Elevated Temperature”, Таллин, Эстония, 29 мая - 2 июня 2012
12. 41-я студенческая научная конференция “Физика космоса”, Коуровка, Россия, 30 января - 03 февраля 2012.
13. Международная конференция “European Week of Astronomy and Space Science” (EWASS 2011), Санкт-Петербург, Россия, 4 - 8 июля 2011.
14. Международный симпозиум IAU “IAUS 270: Computationalstarformation” Барселона, Испания, 31 мая - 4 июня 2010.

Публикации по теме диссертации

1. Кочина, О.В., Вибе, Д.З., Каленский, С.В., Васюнин А.И. Моделирование образования сложных молекул в протозвездных молекулах // Астрономический журнал. — 2013. — Т. 90, № 11. — С. 892 – 906.

2. Кочина О. В., Вибе Д. З. Пылинки различных размеров и химическая эволюция протозвездных объектов // *Астрономический журнал*. — 2014. — Т. 91, № 4. — С. 287 – 298.
3. O. Kochina, D. Wiebe Organic Compounds in Star Forming Regions // *Origins of Life and Evolution of Biospheres*. — 2014. — V.44. — P. 169 – 174.
4. Кочина, О.В., Вибе, Д.З. Возможности диагностики эволюционных стадий протозвездного объекта по наблюдениям сложных молекул // *Астрономический журнал*. — 2015.— Т. 92 № 8. — С. 635 – 645.
5. Кочина, О.В., Вибе, Д.З. Метод диагностики элементного состава протозвездных объектов // *Астрономический журнал*. — 2017. — Т. 94, № 2 – С. 114 – 126.
6. Кочина О. В., Вибе Д. З. Васюнин А. И. Моделирование образования сложных молекул в протозвездных объектах // *Сборник трудов 41-я студенческой научной конференции “Физика космоса”*. — 2012. — С. 244.
7. Кочина О. В., Вибе Д. З. Возможности диагностики эволюционной стадии молекулярного облака // *Сборник трудов 44-я студенческой научной конференции “Физика космоса”*. — 2015. — С. 209.
8. Кочина О. В., Вибе Д. З. Возможности диагностики начального элементного состава протозвездного объекта по наблюдениям сложных молекул // *Сборник трудов 45-я студенческой научной конференции “Физика космоса”*. — 2016. — С. 252.

1. Физико-химическое моделирование протозвездных объектов

В данной главе представлены результаты астрохимического моделирования двух протозвездных объектов, находящихся на существенно различных эволюционных стадиях, — ТМС-1С и DR21(ОН)М. В разделе 1.2 представлена используемая модель. Результатам моделирования объектов ТМС-1С и DR21(ОН)М посвящены, соответственно, разделы 1.3 и 1.4. Выводы из проведенного исследования обсуждаются в разделе 1.5. Результаты исследования опубликованы в статьях Кочина, О. В., Вибе, Д. З., Каленский, С. В., Васюнин А. И. Моделирование образования сложных молекул в протозвездных молекулах // *Астрономический журнал*. — 2013. — Т. 90, № 11. — С. 892 - 906. и O. Kochina, D. Wiebe Organic Compounds in Star Forming Regions // *Origins of Life and Evolution of Biospheres*. — 2014. — V. 44. — P. 169 – 174.

1.1. Химическая эволюция протозвездных объектов

Процесс звездообразования происходит в плотных ядрах молекулярных облаков. Протозвездные ядра формируются в процессе коллапса — падения вещества облака на его центральную часть, которая впоследствии, набирая массу, становится протозвездой, разогревается сама и прогревает оболочку вокруг себя. Один из ключевых вопросов, стоящих перед теорией звездообразования, состоит в установлении эволюционной стадии объекта, а также характерных продолжительностей различных этапов коллапса (напр. [25]).

Принято считать, что различным стадиям эволюции протозвездных

объектов соответствуют различные молекулы-индикаторы. Так, на стадии дозвездного ядра основными наблюдаемыми молекулами являются CO, HCO^+ , CS (оболочка), N_2H^+ , N_2D^+ , NH_3 , H_2D , D_2H^+ , D_3^+ (ядро). Химический состав на этой стадии определяется эффектами вымораживания большинства молекул на пылевых частицах. Протозвездные объекты класса 0 определяются по наличию в спектре линий N_2H^+ , NH_3 (оболочка), H_2O , SiO, CH_3OH , SO (истечения) и сложных органических соединений (горячие ядра). В данном случае молекулярный состав объясняется испарением пылевых мантий с выбросом в газовую фазу сложных молекул, синтез которых происходил на пылинках. Принцип химического моделирования состоит в том, что, корректно воспроизводя химический состав наблюдаемой области, возможно определить физическое состояние, в котором находится объект.

1.1.1. Основные принципы астрохимического моделирования

Для изучения химического состава областей звездообразования используется компьютерное моделирование, симулирующее химическую эволюцию в заданных физических условиях. В основе астрохимического моделирования лежит химическая кинетика – наука, изучающая механизм и закономерности протекания химических процессов во времени.

Химическая кинетика в той форме, в которой она используется в астрохимическом моделировании, определяет скорости химических реакций и их зависимость от концентрации реагентов и температуры. Химическая реакция состоит в превращении одного или нескольких химических веществ (реагентов) в одно или несколько других (продукты). Совокупность всех реакций, которые могут в данных условиях протекать в реакционной системе и в сумме реализуют превращение конкретного компонента, называется механизмом химической реакции.

В присутствии пыли реакции разделяются на протекающие в газовой

фазе и протекающие на поверхности пылинок (поверхностные реакции). Аккреция и десорбция – процессы, ответственные за переход компонента из одной фазы в другую. Вклад того или иного процесса в общую химическую эволюцию зависит от условий в облаке. Однако принято считать, что в газовой фазе образуются, главным образом, простые молекулы, а сложные молекулы синтезируются на поверхности пылинок и затем возвращаются в газовую фазу за счет десорбции.

В молекулярных облаках среда достаточно разрежена, чтобы реакции с участием трех или более реагентов были маловероятны. Потому основные реакции, протекающие в газовой среде облака, это двухчастичные реакции. Это реакции образования, разрушения и реакции обмена. В зависимости от реагентов, реакции также разделяются на нейтрально-нейтральные, ион-нейтральные, рекомбинационные реакции, фотореакции (с фотонами) и реакции с космическими лучами.

Большинство нейтрально-нейтральных реакций зависят от температуры и имеют потенциальный барьер реакции. Потому скорости таких реакций в условиях холодного молекулярного облака очень малы. За исключением особых случаев, нейтрально-нейтральные реакции почти не влияют на протекание химической эволюции в облаке. Более вероятны реакции ион-нейтральные. У них нет потенциальных барьеров, и они не зависят от температуры. Именно такие реакции принято считать основными для химической эволюции областей звездообразования, особенно для ранних его стадий. Тем не менее, для протекания реакций необходимо некоторое количество ионов в среде. Начальная ионизация создается частицами космических лучей.

Достаточно недавно исследователи начали рассматривать и ион-ионные реакции. С тех пор как отрицательные ионы были открыты и включены в сетки реакций, реакции ассоциативного отрыва также принимаются во внимание. Также в газовой среде происходят реакции взаимодействия

ионов и электронов, приводящие к рекомбинации или диссоциативной рекомбинации. Фотореакции приводят к ионизации и/или диссоциации компонентов.

Газофазные реакции способны объяснить существующие содержания многих молекул, но ими не удастся объяснить самый главный процесс — молекуляризацию водорода. Процесс образования молекулярного водорода в газе идет крайне медленно. Единственным возможным объяснением существования молекулярных облаков таким образом становится эффективность образования молекулярного водорода на поверхности пылинок.

Другие молекулы также могут прилипнуть к поверхности пылинок или образоваться там. В условиях низкой температуры при столкновении с пылинкой молекула вмораживается в нее. На пылинке она может удерживаться силами ван дер Ваальса (физисорбция) или химическими связями (хемисорбция). Если молекула удерживается химическими связями, то она не способна перемещаться по поверхности пылинки и может взаимодействовать с другими молекулами только в случае прямой аккреции на нее. Вероятность такого события достаточно мала.

Физическая абсорбция предоставляет молекуле гораздо больше свободы. Она может передвигаться по поверхности пылинки путем теплового перепрыгивания. Однако при низких температурах только самые легкие молекулы могут так перемещаться. Когда молекула, перемещаясь по поверхности пылинки, оказывается возле другой молекулы, они могут вступить в реакцию и образовать одну или несколько новых молекул. Тяжелые молекулы остаются на одном месте достаточно долго, потому они могут постепенно включить в себя большее число компонентов, чем молекулы газовой фазы. Для объяснения процессов происходящих на пылинках используется поверхностная химия.

Десорбция — процесс возвращения молекулы обратно в газовую фазу. Она может быть тепловой, в которой скорость испарения зависит от тем-

пературы, или нетепловой, например происходящей при столкновении с частицей космических лучей, поглощении УФ фотона или благодаря энергии, выделившейся при экзотермических поверхностных реакциях.

Математическое представление химической эволюции задается уравнениями

$$\frac{dn_i^g}{dt} = \sum_j \sum_l K_{lj}^g n_l^g n_j^g - n_i^g \sum_j K_{ij}^g n_j^g - k_i^{\text{acc}} n_i^g + k_i^{\text{des}} n_i^d \quad (1.1)$$

для реакций в газовой фазе и

$$\frac{dn_i^d}{dt} = \sum_j \sum_l K_{lj}^d n_l^d n_j^d - n_i^d \sum_j K_{ij}^d n_j^d + k_i^{\text{acc}} n_i^d - k_i^{\text{des}} n_i^g \quad (1.2)$$

для реакций на поверхностях пылинок.

В данном подходе пыль рассматривается как непрерывная среда, что, вообще говоря, не вполне корректно. Однако более корректный подход потребует гораздо более сложной методологии (например, [26]). Коэффициенты k^{acc} и k^{des} это скорости аккреции и десорбции, соответственно. Коэффициенты K_{ij}^g и K_{ij}^d используются для расчета двухчастичных реакций. Эти коэффициенты различны для реакций различных типов.

Согласно закону Аррениуса для двухчастичных реакций

$$K_{ij} = \alpha_{ij} \left(\frac{T}{300} \right)^{\beta_{ij}} \exp(-\gamma_{ij}/T) \quad (1.3)$$

для реакций, в которых оба реагента являются химическими компонентами. Параметры α , β и γ определяются либо путем расчета, либо экспериментально. Для фотореакций:

$$k = G_0 \alpha \exp(-\gamma A_V), \quad (1.4)$$

где α это коэффициент скорости для неэкранированного УФ поля, γ опре-

деляет убывание скорости реакции, A_V — экстинкция в видимом диапазоне. Интенсивность поля излучения описана безразмерным множителем G_0 , выраженным в единицах среднего межзвездного поля в окрестности Солнца [27].

Для прямой ионизации космическими лучами:

$$k = \alpha \zeta \quad (1.5)$$

Здесь, ζ — константа скорости ионизации космическими лучами на молекулу H_2 , обычно принятая равной 10^{-17} с^{-1} [28]. Эта формализация позволяет описывать скорости всех реакций при помощи всего трех параметров α , β и γ . Получается система дифференциальных уравнений, доступная для решения рядом публичных программ, таких как DVODE или VODE.

Параметры α , β и γ , требуемые для расчета скоростей реакций, содержатся в сводном виде в специальных базах данных для астрохимии. Реагентами могут являться молекулы, ионы, радикалы, атомы, электроны, фотоны, частицы космических лучей и, иногда, пылинки (в реакциях диссоциативной рекомбинации, например). В базы также может быть включена дополнительная информация, например, диапазон температур, в котором использование коэффициентов актуально, или информация о теплоте образования. Две наиболее широко используемые базы данных для астрохимии межзвездной среды это UMIST Database for Astrochemistry (UDFA) [29] и KIDA (Kinetic Database for Astrochemistry) [30].

1.2. Модель протозвездного объекта

Модель химической эволюции дозвездных и протозвездных объектов “Presta”, использованная в диссертационной работе, разрабатывается в Институте астрономии РАН с 1994 года [18, 31, 32]. В версии, использованной в данном исследовании, она позволяет моделировать химическую эволюцию

сферически-симметричного ядра, освещенного как внешним диффузным излучением, так и центральным источником (протозвездой) с заданными параметрами [33, 34].

С целью проведения исследования, диссертантом было выполнено совмещение двух астрохимических программных кодов: управляющей части программного кода Васюнина, позволившей реализовать переход от модели 0D к модели 1D, и химической части исходного программного кода “Presta”, ранее уже применявшегося для исследований, описанных в статьях [18, 31, 32], упомянутых выше.

Распределения температуры, плотности и поля излучения в сферически симметричном приближении рассчитываются при помощи модели переноса излучения [34] или задаются вручную на основе наблюдательных данных. Начальный химический состав, используемый в данной работе, приведен в таблице 1.1. Скорости реакций рассчитываются на основе данных из базы UMIST [29]. Модель включает в себя 582 компонента и 4524 газофазных реакции. Кроме того, учитываются формирование и разрушение пылевых молекулярных мантий и поверхностные реакции [35, 36]. Для решения системы ОДУ и расчета скоростей реакций используется решающая программа DVODE.

Результаты расчета 1D-структуры объекта позволяют получить лучевые концентрации молекул для заданного момента времени, эти лучевые концентрации сравниваются со значениями, выведенными из наблюдений. Согласие наблюдений с моделью считается приемлемым, если для конкретного компонента различие между теоретической лучевой концентрацией и лучевой концентрацией, выведенной из наблюдений, не превосходит одного порядка.

Таблица 1.1. Начальные содержания компонентов относительно водорода, используемые в данной главе

Компонент	Содержание
C	0.73(−4)
N	0.214(−4)
O	0.176(−3)
F	0.2(−7)
He	0.14
Si ⁺	0.3(−8)
S ⁺	0.2(−7)
Cl ⁺	0.3(−8)
Na ⁺	0.3(−8)
Mg ⁺	0.3(−8)
F ⁺	0.3(−8)
P ⁺	0.3(−8)
Пыль	0.2(−12)

1.3. ТМС-1: Моделирование области образования звезд малой массы

В ходе работы было проведено моделирование молекулярного облака ТМС-1, в котором, как предполагается, происходит формирование звезд малой массы. Облако расположено на расстоянии порядка 140 пк [37] и входит в состав молекулярной области Тельца (Taurus Molecular Region, TMR). ТМС-1 достаточно хорошо исследовано как в континууме [38], так и в линиях [39].

Наблюдения в различных молекулярных линиях показали, что облако вытянуто примерно на 0.6 пк с юго-востока на северо-запад [40–42]. Картирование в линиях CS и CCS [43,44] свидетельствует, что облако представляет собой не единую структуру, а цепочку отдельных плотных сгустков, для обозначения которых используются буквы А-Е [44]. Различия в распределении молекул в различных областях облака, а также обнаружение IRAS-

источника в его северо-западной части позволяют предположить, что звездообразование в различных областях ТМС-1 находится на разных стадиях, от молодой юго-восточной до проэволюционировавшей северо-западной частей [44–46].

Объектом нашего моделирования является один из таких сгустков: плотное беззвездное ядро ТМС-1С. Масса центральной области в радиусе 0.06 пк оценивается в $6 M_{\odot}$. Этому ядру, как и ТМС-1 в целом, свойственна богатая углеродная химия, что делает его интересным объектом для изучения. Для сравнения модели с наблюдениями нами использованы данные [47] по молекулярному составу ТМС-1, приведенные в таблице 1.2. В работе [47] даны содержания 48 молекул. Из них в базе UMIST имеется 43, что позволяет провести максимально полное сравнение. Нужно отметить, что данные [47] неоднократно использовались для тестирования химических моделей (см. напр. [48]) в одноточечном приближении. Однако эти данные, хотя и приведены в виде относительных содержаний, на самом деле представляют собой лучевые концентрации, благодаря чему они более подходят для исследования в многоточечной модели, в которой учитывается неоднородное распределение вещества и температуры в объекте.

Распределения плотности и температуры для моделирования ТМС-1С взяты из работы [38] (рис. 1.1, пунктирные линии). Согласно этой работе, температура в ядре варьируется от 5.8 К в центре до 40 К на периферии, а плотность в этой же области убывает от 10^7 см^{-3} до 10^3 см^{-3} . Поскольку ТМС-1С — беззвездное ядро, внутренний источник в модель не включался. Предполагалось, что облако освещено межзвездным полем излучения, интенсивность которого составляет 1.8 единиц Дрейна [27].

Для этого распределения физических параметров химическая эволюция облака моделировалась на протяжении 10^7 лет (физические параметры полагались неизменными). Для ряда моментов времени рассчитывались лучевые концентрации 43 молекул из таблицы 1.2 и сравнивались с наблю-

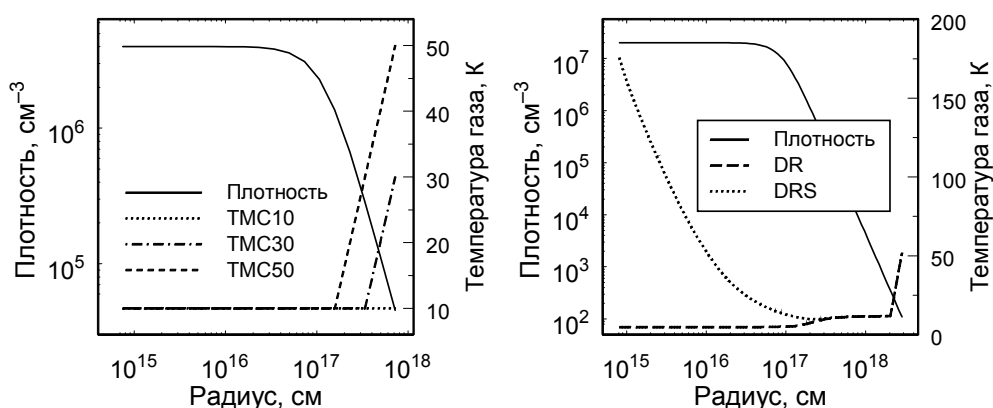


Рис. 1.1. Распределения плотности (справа) и температуры (слева) в рассматриваемых моделях.

даемыми значениями.

На рис. 1.2 показано относительное число молекул, для которых достигнуто согласие с наблюдениями, в зависимости от возраста модели. Видно, что для ТМС-1С существует четкий пик совпадения наблюдаемых данных с рассчитанными (38 компонентов из 43), соответствующий возрасту $8 \cdot 10^4$ лет. Молекулы, теоретические лучевые концентрации которых согласуются с наблюдаемыми в пределах порядка величины, отмечены в таблице 1.2 знаками "+". Химический возраст наилучшего согласия по порядку величины согласуется с результатами других исследователей [47, 49, 50], хотя и несколько уступает им. В одноточечных моделях, как правило, для ТМС задается плотность $2 \cdot 10^4$ см⁻³. В принятом нами распределении имеются и более высокие значения плотности, что ускоряет химическую эволюцию.

В целом, воспроизведение наблюдений области образования звезд малой массы представляется удачным. Важно отметить, что результаты расчетов совпали с наблюдаемыми данными не только для простых, но и для сложных органических молекул, например $\text{CH}_3\text{C}_4\text{H}$, CH_2CHCN , CH_3CHO . Однако для некоторых молекул зафиксировано существенное расхождение между наблюдаемой и теоретической лучевой концентрацией. В случае NO и HCS^+ расхождение может быть связано с неполнотой использованной сетки химических реакций и (или) с неточностями в коэффициентах

Таблица 1.2. ТМС-1С: лучевые концентрации по данным наблюдений и рассчитанные в модели для $t = 8 \cdot 10^4$ лет

Компонент	Модель	Наблю-	Согласие	Компонент	Модель	Наблю-	Согласие
		дения				дения	
CO	3.7(18)	8.0(17)	+	HC ₉ N	1.2(12)	3.0(12)	+
C ₂ O	3.0(11)	6.0(12)		CH ₂ CHCN	2.9(11)	2.0(12)	+
C ₃ O	8.2(12)	1.0(12)	+	CS	1.0(14)	1.0(14)	+
C ₂	8.3(13)	5.0(14)	+	HCS ⁺	6.2(10)	6.0(12)	
OH	3.6(14)	3.0(15)	+	C ₂ S	1.3(13)	8.0(13)	+
CH	9.2(13)	2.0(14)	+	C ₃ S	5.9(12)	1.0(13)	+
C ₂ H	7.1(13)	7.0(14)	+	HCO ⁺	7.2(13)	8.0(13)	+
C ₃ H	2.6(13)	5.0(12)	+	H ₂ CO	3.0(14)	2.0(14)	+
C ₄ H	2.1(13)	2.0(14)	+	H ₂ CCO	4.8(13)	1.0(13)	+
C ₅ H	7.9(12)	3.0(12)	+	OCS	6.0(12)	2.0(13)	+
C ₆ H	2.3(12)	1.0(12)	+	SO	8.4(12)	5.0(13)	+
CH ₃ CCH	7.9(12)	6.0(13)	+	SO ₂	3.2(12)	7.0(12)	+
CH ₃ C ₄ H	4.3(11)	2.0(12)	+	CH ₃ CHO	2.0(12)	6.0(12)	+
CN	1.8(14)	3.0(14)	+	C ₃ H ₂	1.4(14)	1.0(14)	+
C ₃ N	1.8(12)	1.0(13)	+	CH ₃ OH	2.8(10)	2.0(13)	
CH ₃ CN	2.0(13)	1.0(13)	+	CH ₂ CN	7.1(12)	5.0(13)	+
CH ₃ C ₃ N	1.7(12)	5.0(12)	+	H ₂ S	1.9(11)	3.0(11)	+
HCN	5.0(14)	2.0(14)	+	H ₂ CS	4.5(13)	3.0(13)	+
HNC	4.7(14)	2.0(14)	+	NO	2.7(16)	2.5(14)	
HCNH ⁺	5.6(12)	1.9(13)	+	HCOOH	4.7(13)	1.0(12)	
HC ₃ N	2.5(14)	6.0(13)	+				
HC ₅ N	3.8(13)	3.0(13)	+				
HC ₇ N	8.2(12)	1.0(13)	+				

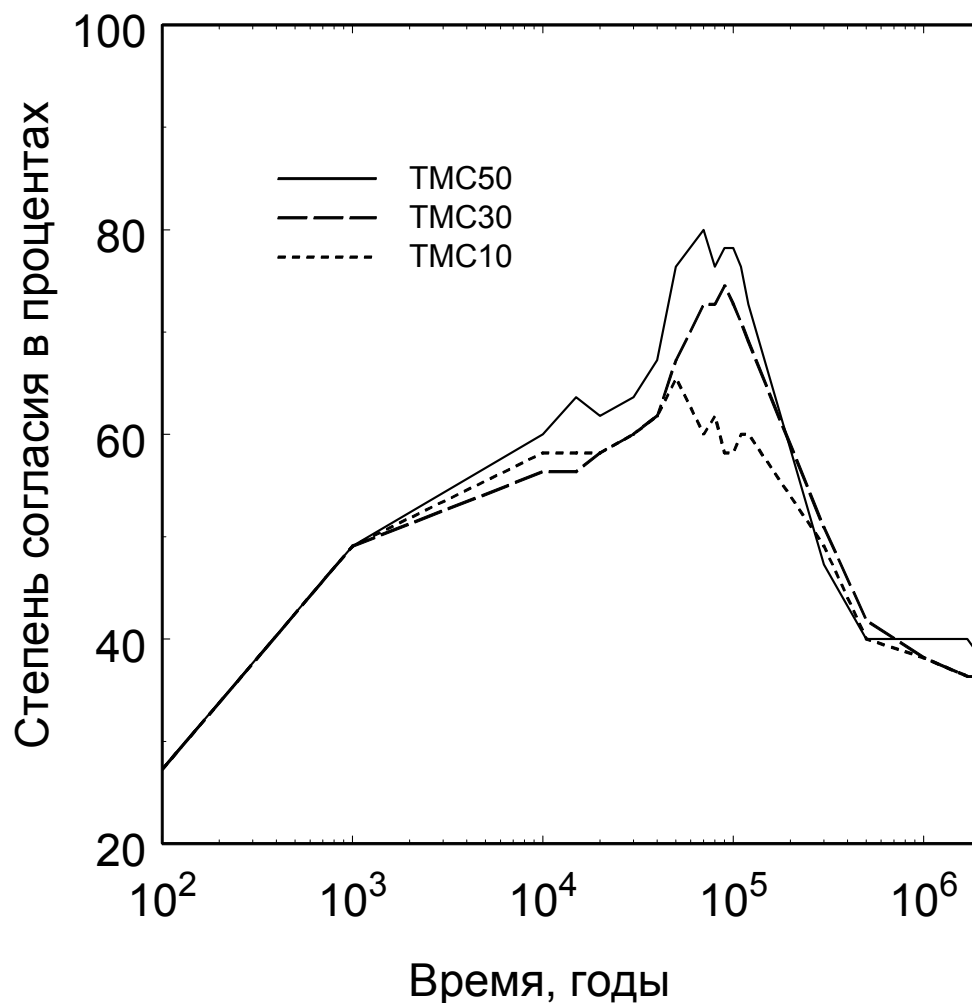


Рис. 1.2. Доля молекул в модели ТМС-1С, для которых достигнуто согласие с наблюдениями, в зависимости от возраста модели.

скоростей. Существенно (почти на три порядка) недостаточным оказывается содержание метанола. Оно, очевидно, связано с отсутствием в модели поверхностных реакций — основного канала синтеза метанола в межзвездной среде. Этими же причинами вызвано, вероятно, и расхождение в углеродных цепочках C_2O . Следует, однако, отметить, что при отсутствии внутреннего источника нагрева даже включение в модель поверхностных реакций не решит проблему низкого газофазного содержания метанола. Эти реакции увеличат его содержание на пылевых частицах, но не в газе.

На рис. 1.3 показана эволюция лучевых концентраций ряда молекул, нормированная на наблюдаемую лучевую концентрацию. Все молекулы, для которых достигнуто согласие с наблюдениями (в рамках принятого

нами критерия), можно разделить на три группы. Лучевые концентрации молекул из первой группы (это, как правило, двухатомные молекулы) отличаются от наблюдаемых лучевых концентраций не более чем на порядок величины на протяжении практически всего рассматриваемого интервала времени (рис. 1.3а). У молекул из второй группы (рис. 1.3б) согласие с наблюдениями достигается либо до момента наилучшего согласия, либо после него. В частности, лучевые концентрации цианополининов хорошо согласуются с наблюдениями примерно до момента 10^5 лет, а затем падают из-за вымораживания молекул на пылинках. Наконец, в третью группу входят некоторые органические молекулы, лучевые концентрации которых согласуются с наблюдениями лишь на протяжении относительно короткого интервала времени вблизи 10^5 лет. В эту группу, входят соединения, представленные на рис. 1.3в, а также более сложные молекулы — CH_2CHCN , $\text{CH}_3\text{C}_3\text{N}$, $\text{CH}_3\text{C}_4\text{N}$ и др.

В целом, видно, что момент наилучшего согласия определяется конкуренцией между процессами синтеза сложных молекул и их вымораживанием на пылевых частицах. Положение пика на рис. 1.2, то есть, предполагаемый возраст объекта, определяется довольно жестко, и не столько простыми, сколько сложными молекулами. От простых молекул, подобных CO и HCO^+ , напротив, положение пика не зависит, поскольку их лучевые концентрации со временем практически не меняются.

1.4. DR21(OH)M — сложные молекулы в массивном протозвездном объекте

Далее была смоделирована химическая эволюция более сложного объекта, входящего в состав области звездообразования DR21(OH) в северной части комплекса Лебедь-X на расстоянии 1.5 кпк [51]. Эта область многократно исследовалась как в континууме [52–56], так и в линиях различных молекул [55, 57–60]. Отсутствие зон ионизованного водорода [59]

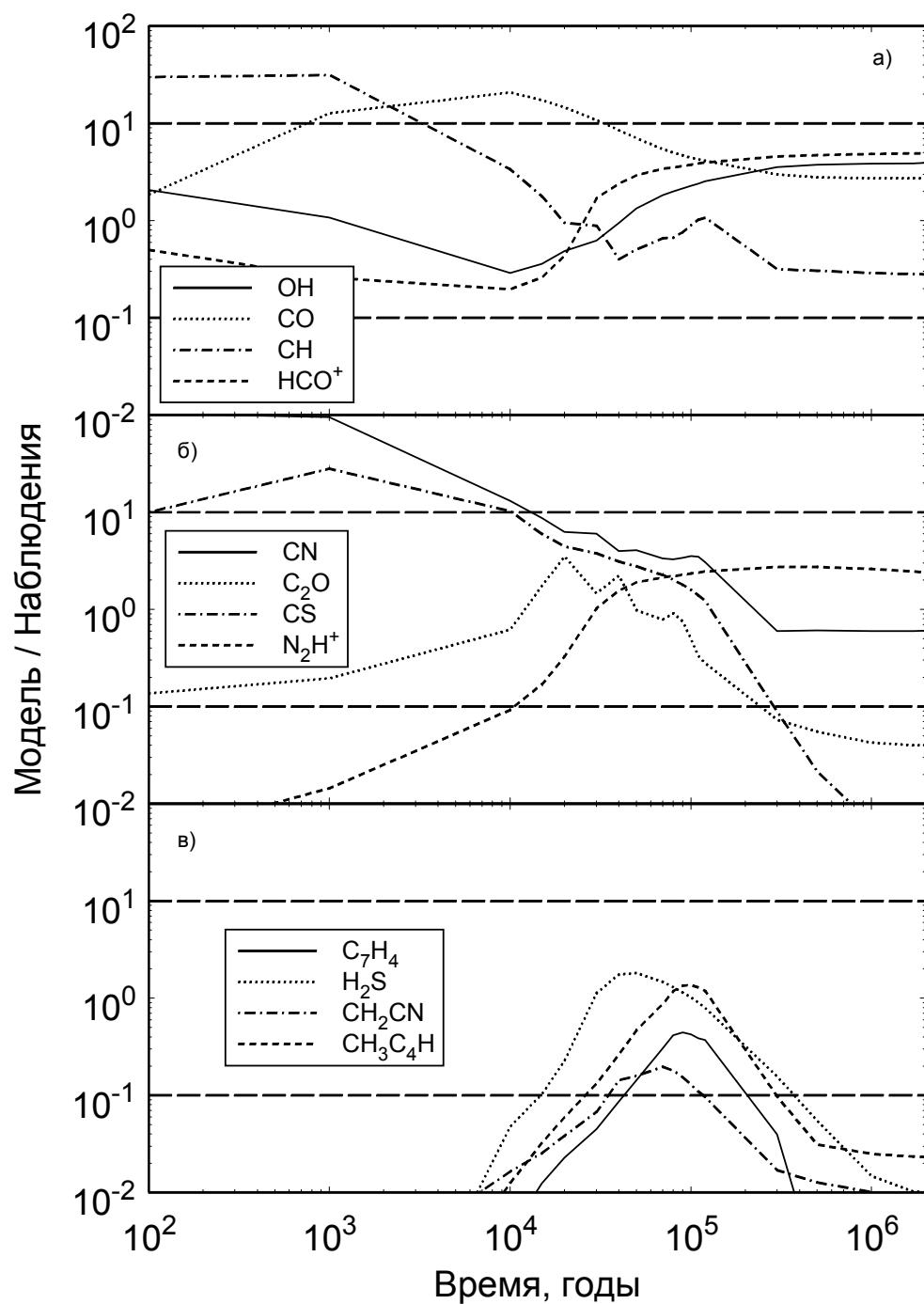


Рис. 1.3. Отношение наблюдаемой и теоретической лучевой концентрации в зависимости от возраста модели для ряда молекул.

говорит о том, что образование массивных звезд в DR21(OH) находится на ранней стадии.

Область DR21(OH) сильно неоднородна и разделяется на несколько ядер: М (разделяющегося в свою очередь на MM1 и MM2 [61]), N, W и S. Наиболее интенсивными источниками являются ядра MM1 и MM2, в которых проходят активные процессы звездообразования, о чем свидетельствует наличие мощных мазеров OH [62], H₂O [63] и CH₃OH [64]. Объект MM1 представляет собой ядро с температурой порядка 60 К и массой $350 M_{\odot}$ [52]. Предполагается, что в MM1 находится по крайней мере одна звезда до главной последовательности [55], глубоко погруженная в плотную газовую оболочку. Второе ядро MM2, менее яркое, чем MM1, на всех длинах волн, более холодное (30 К) и массивное ($570 M_{\odot}$) [52]. Предполагается, что в нем находится ранняя В-звезда [55].

Для сравнения модели с наблюдениями нами использованы, главным образом, данные спектрального сканирования [65]. Авторами работы [65] при помощи радиотелескопа Онсальской обсерватории получен спектр в направлении источника DR21(OH)М в диапазоне 84–115 ГГц. ЛТР-анализ полученных линий позволил оценить лучевые концентрации 32 молекул и (или) их изотопомеров, начиная с простых соединений, например, CO, CS и HCN, и заканчивая сложными органическими молекулами, например CH₃OCHO и CH₃OCH₃. Из 32 наблюдаемых молекул в базе UMIST присутствует 24. Полный список этих молекул и их лучевые концентрации, полученные в [65], представлены в таблице 1.3. В тех случаях, когда лучевая концентрация известна только для изотопомера, она пересчитывалась в лучевую концентрацию молекулы с основным изотопом с использованием коэффициентов 500 для ¹⁸O, 275 для ¹⁵N, 60 для ¹³C и 23 для ³⁴S. Помимо молекул из работы [65] в рассмотрение были включены также лучевые концентрации ряда других компонентов, измеренные в DR21(OH)М в работах [58, 66, 69, 70].

Таблица 1.3. DR21(OH)M: лучевые концентрации по данным наблюдений и рассчитанные в модели для $t = 5 \cdot 10^4$ лет

Компонент	Модель DR	Модель DRS	Наблю- дения	Источник
C ₂ H	6.8(13)	5.6(13)	3.6(15)	[65]
H ₂ CCC	2.3(12)	2.6(12)	4.0(12)	[65]
C ₃ H ₂	6.2(13)	7.1(13)	7.4(13)	[65]
CH ₂ NH	6.0(12)	8.1(12)	5.2(13)	[65]
CH ₂ CHCN	1.9(09)	1.0(11)	7.0(12)	[65]
CH ₃ OH	6.2(10)	6.3(10)	5.2(15)	[65]
CN	3.6(14)	3.6(14)	5.0(14)	[65]
CO	2.0(18)	9.0(19)	1.6(19)	[65]
CS	2.1(13)	3.7(13)	3.6(14)	[65]
HC ₃ N	2.8(13)	3.3(13)	1.0(14)	[65]
HCN	3.9(14)	3.2(14)	1.8(14)	[65]
HCO	5.3(12)	6.8(12)	9.8(13)	[65]
HCO ⁺	1.4(14)	5.2(14)	1.4(14)	[65]
H ₂ CO	2.9(14)	2.9(14)	2.7(14)	[65]
HCOOH	1.4(14)	6.4(14)	4.0(13)	[65]
HCS ⁺	1.6(10)	2.8(10)	1.0(13)	[65]
H ₂ CS	7.1(12)	8.8(13)	2.3(15)	[65]
H ₂ CCO	5.1(12)	7.4(12)	3.5(13)	[65]
HNC	4.0(14)	3.1(14)	1.7(14)	[65]
N ₂ H ⁺	4.5(14)	4.4(14)	9.2(13)	[65]
NS	3.8(11)	9.9(11)	5.1(13)	[65]
OCS	1.2(13)	5.0(13)	1.8(14)	[65]
SiO	5.9(13)	4.6(14)	2.1(13)	[65]
SO	2.9(13)	4.3(14)	8.6(14)	[65]
NH ₃	1.7(16)	1.8(16)	1.8(16)	[66]
HCl	7.0(12)	1.7(14)	1.0(14)	[69]
C ⁺	2.6(17)	2.6(17)	1.5(17)	[58]
C	6.6(17)	6.6(17)	5.2(17)	[58]
C ₃	1.8(15)	1.8(15)	2.2(14)	[70]

Таблица 1.4. Примерные параметры массивного протозвездного объекта DR21(OH)M по данным различных наблюдений.

Обозначение	Поверхностная плотность, см^{-2}	Объемная плотность, см^{-3}	Масса, $M_{\odot}$	Источник
DR21(OH)M	$7 \cdot 10^{24}$	$1.1 \cdot 10^7$	4300	[54]
DR21(OH)MM1+MM2	10^{25}	$5 \cdot 10^7$	~ 1000	[55]
DR21(OH)M	$3.3 \cdot 10^{24}$	$3.9 \cdot 10^6$	2100	[67]
N44, DR21(OH)	—	10^6	446	[68]
DR21(OH)	$2.6 \cdot 10^{23}$	—	1814	[58]

Детальные данные о распределении температуры и плотности в объекте DR21(OH)M в литературе отсутствуют, хотя известно, что он обладает сложной структурой [71]. В различных статьях приводятся лишь диапазоны параметров или их характерные значения (см. табл. 1.4). Чтобы примерно оценить лучевые концентрации химических компонентов в DR21(OH)M также была использована простая сферически-симметричная модель, однако в данном случае ее следует рассматривать не как реальное представление геометрии объекта, а скорее как набор точек вдоль луча зрения, в которых физические параметры варьируются в диапазоне, характерном для DR21(OH)M.

Нами рассмотрено две модели. В модели DR объект считается полностью беззвездным, и нагрев пыли и газа в нем вызывается только внешним полем излучения (температуры газа и пыли считаются равными). В модели DRS плотная часть объекта подсвечена протозвездой с эффективной температурой 10000 K. Принятые распределения температуры и плотности показаны на рис. 1.1: температура в модели DRS варьируется от 170 K во внутренней области до 12 K на внешней границе. В модели DR облако везде остается холодным. Плотность в обоих случаях изменяется от $2 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$ в “центре” объекта до 100 см^{-3} на его границе. Этому распределению соответствуют лучевая концентрация $2 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-2}$ и масса около $500 M_{\odot}$, что попадает в пределы диктуемые наблюдениями. Начальные содержания

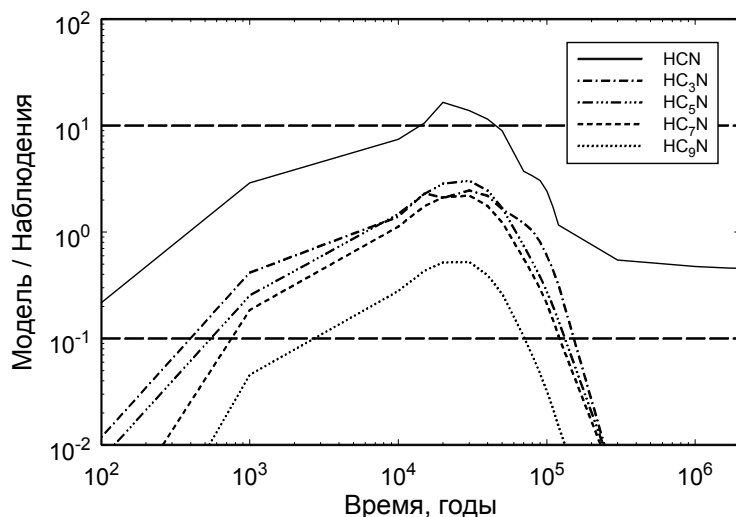


Рис. 1.4. Доля молекул в моделях DR21(OH)M, для которых достигнуто согласие с наблюдениями, в зависимости от возраста.

химических компонентов те же, что использовались при моделировании TMC-1C.

Сравнение модельных и наблюдаемых лучевых концентраций приводится на рис. 1.4. Из рисунка видно, что для DR21(OH)M интервал времени наилучшего согласия наблюдаемых данных с рассчитанными более протяженный, чем для TMC-1C. Формально для обеих моделей время наилучшего согласия равно $5 \cdot 10^4$ лет (20 согласующихся компонентов из 29). Однако в целом согласие остается примерно одинаковым на всем интервале от 10^4 до 10^5 лет.

Полный список рассмотренных атомов и молекул приведен в таблице 1.3. Полу жирным начертанием выделены компоненты, для которых в модели DR или модели DRS достигнуто согласие с наблюдениями. На рис. 1.5а показано, как изменяется со временем лучевая концентрация некоторых молекул, для которых формальное согласие с наблюдениями в момент $t = 5 \cdot 10^4$ лет достигнуто в обеих моделях и у которых эволюция в моделях DR и DRS проходит практически одинаково (по крайней мере, на временах менее нескольких миллионов лет; показаны графики только для модели DR).

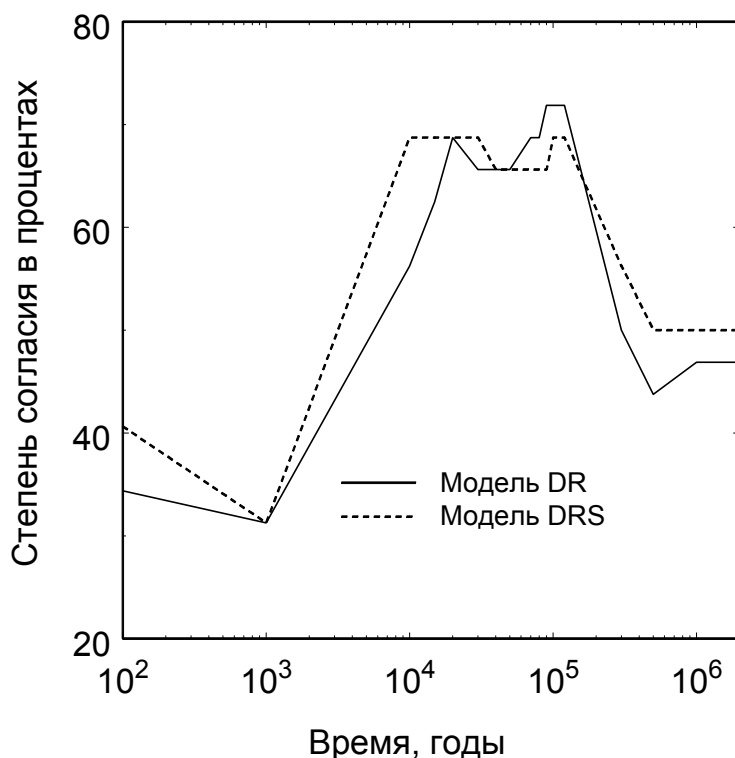


Рис. 1.5. Отношение наблюдаемой и теоретической лучевой концентрации в зависимости от возраста модели DR21(OH)M для ряда молекул.

У ряда молекул из 29 рассмотренных эволюция в моделях DR и DRS проходит существенно по-разному, хотя при этом на момент $t = 5 \cdot 10^4$ лет в обеих моделях результаты расчетов формально согласуются с наблюдениями. Два характерных примера показаны на рис. 1.5б. В модели DR лучевая концентрация молекулы CO (сплошная линия) удовлетворяет выбранному критерию согласия с наблюдениями только на временах меньше 10^5 лет. В модели DRS повышенная температура в центральных ячейках приводит к формированию области повышенного содержания CO, которая дает существенный вклад в общую лучевую концентрацию (см. также рис. 1.6а), и потому согласие с наблюдениями достигается на протяжении всего рассмотренного интервала времени.

Ситуация с молекулой CH_2NH (рис. 1.5б и 1.6а) более сложная. В модели DR вблизи $t = 5 \cdot 10^4$ лет содержание этой молекулы лишь на протяжении короткого времени отличается от наблюдаемого менее чем на порядок. В модели DRS повышенная температура приводит к более высокому

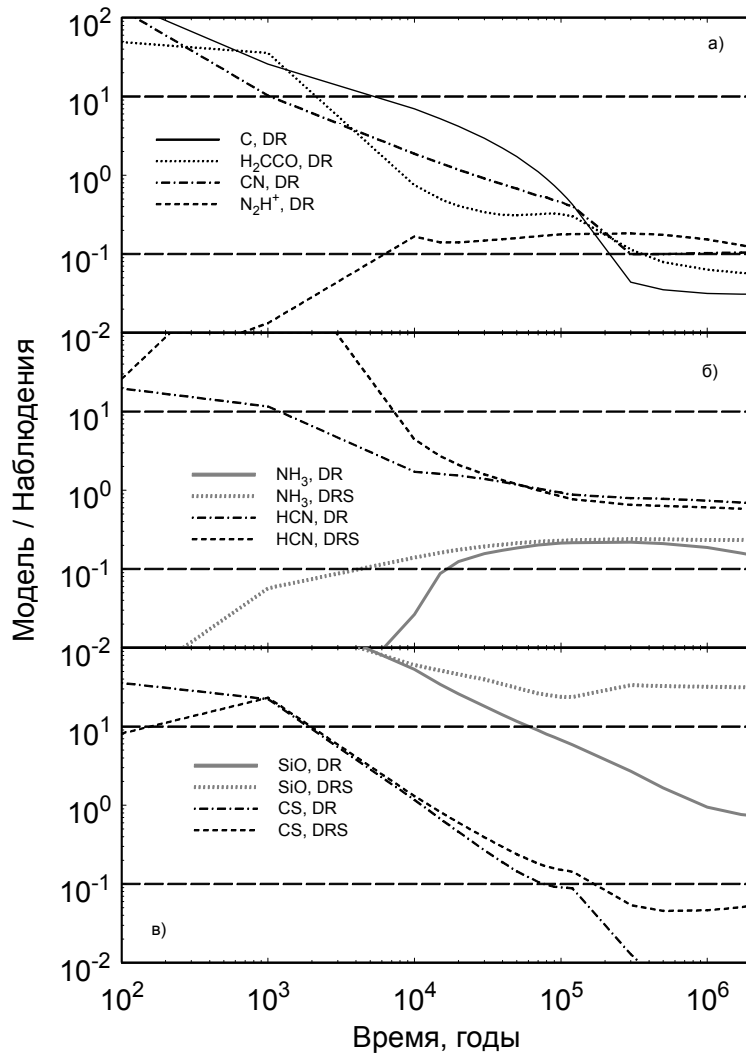


Рис. 1.6. Радиальные профили относительного содержания ряда молекул в моделях DR21(OH)M для момента $t = 5 \cdot 10^4$ лет.

содержанию CH_2NH при $r \sim 10^{17}$ см, однако на меньших расстояниях содержание резко падает из-за фотодиссоциации. В результате лучевая концентрация CH_2NH несколько выше, однако рост далеко не так значителен, как для молекулы CO . Однако этого незначительного роста достаточно, чтобы в модели DRS согласие с наблюдениями достигалось почти на всем рассмотренном временном промежутке.

На рис. 1.5в показана эволюция лучевых концентраций HCl и SiO . Для этих молекул согласие с наблюдениями достигается только в одной из двух рассмотренных моделей. В модели DRS содержание обеих молекул в центральных ячейках существенно повышено (рис. 1.6б), что приводит и к росту лучевой концентрации. При этом HCl входит в интервал согласия из-за повышения лучевой концентрации, а SiO , напротив, выходит из него.

Наконец, для семи компонентов — C_2H , CH_2CHCN , CH_3OH , H_2CS , HCO , HCS^+ , NS — согласие с наблюдениями при $t = 5 \cdot 10^4$ лет не достигается ни в одной модели. При этом в подавляющем большинстве случаев теоретическая лучевая концентрация оказывается существенно ниже наблюдаемой, причем не только при $t = 5 \cdot 10^4$, но и практически во все моменты времени. В частности, модель предсказывает существенный дефицит метанола, и причины этого вполне понятны: метанол образуется не в газовой фазе, а на поверхностях пылевых частиц. Поэтому в обеих моделях большая часть молекул метанола сосредоточена в ледяных мантиях на пылинках (рис. 1.6в; буквой “s” обозначено поверхностное содержание). Моменту $t = 5 \cdot 10^4$ лет соответствует лучевая концентрация метанола в твердой фазе порядка 10^{14} см^{-2} . Это значение все еще существенно ниже наблюдаемого, однако ясно, что решение проблемы низкого содержания метанола лежит в более корректном учете поверхностных реакций и процессов испарения ледяных мантий. Несколько более эффективная десорбция решит и проблему недостаточного содержания HCO в газовой фазе. Лучевая концентрация этой молекулы в твердой фазе на момент $5 \cdot 10^4$ лет

составляет примерно 10^{15} см^{-2} , что значительно выше наблюдаемого содержания. Аналогичная ситуация складывается и для молекулы NS.

Полная лучевая концентрация CH_2CHCN достигает значения $\sim 10^{13} \text{ см}^{-2}$, близкого к наблюдаемому, только в модели DRS. Поверхностные реакции синтеза этой молекулы в принятой химической сетке отсутствуют, поэтому ее содержание обуславливается более эффективным газофазным синтезом на границе внутренней нагретой области. Однако, поскольку принятая для этого соединения энергия десорбции достаточно высока (2650 K), синтезированные в газе молекулы вымерзают на поверхности пылинок.

В эволюции молекулы C_2H поверхностные реакции играют противоположную роль. В модели DR ее полная лучевая концентрация (газ и ледяные мантии) равна примерно $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, то есть близка к наблюдаемой. Можно предположить, что фотодесорбция ледяных мантий на этапе образования “горячего ядра” в нужной степени повысит и газофазное содержание этой молекулы. Однако в модели DRS повышенная температура пыли стимулирует поверхностные реакции, преобразующие s- C_2H в более сложные углеродные цепочки, например, s- C_5H_2 , поэтому в этой модели даже полная лучевая концентрация C_2H при $t = 5 \cdot 10^4$ лет не превышает 10^{14} см^{-2} .

Ни поверхностные реакции, ни вымерзание не позволяют в рамках рассмотренных моделей объяснить низкое содержание H_2CS и HCS^+ . Это может быть следствием неполноты химических баз данных в части реакций с серосодержащими соединениями. Однако следует отметить, что эта же модель вполне успешно объясняет содержание серосодержащих молекул в TMC-1C.

1.5. Обсуждение и выводы

До сих пор внимание наблюдателей протозвездных объектов различных масс привлекали, в основном, простые молекулы, наблюдаемые в мил-

лиметровом и сантиметровом диапазонах. Содержание этих молекул определяется небольшим количеством химических реакций и не вызывает трудностей при моделировании. С другой стороны, диагностический потенциал этих молекул, в частности, CO и HCO^+ , на ранних стадиях протозвездной эволюции довольно ограничен. Поэтому представляется необходимым включать в рассмотрение и более сложные соединения, содержание которых сильнее зависит и от физических условий в модели, и от выбранного набора химических реакций, в том числе, поверхностных, и от элементного состава среды, например, от отношения C/O.

В данной главе нами оценена способность “типичной” астрохимической модели предсказывать содержания сложных молекул в протозвездных объектах. Модель химической эволюции “Presta” применена для исследования двух объектов, имеющих различные физические параметры и находящихся на различных стадиях процесса звездообразования. При этом моделирование объекта ТМС-1С можно рассматривать в качестве тестового, поскольку его астрохимические исследования проводились уже неоднократно.

Полученные по ТМС-1С результаты, в основном, согласуются с результатами предыдущих работ. Однако нужно помнить, что здесь рассматривается согласие только для объекта в целом и не исследуется его структура. При более детальном исследовании могут возникнуть дополнительные сложности. В работе [50] отмечено, что в центре ядра началось вымораживание азотсодержащих молекул, в частности, N_2H^+ , что следует считать признаком того, что возраст объекта превышает $3 \cdot 10^5$ лет. С другой стороны, вымораживание CO в том же объекте указывает на значительно меньший химический возраст — порядка 10^4 лет. В работе [50] высказано предположение, что ТМС-1С является относительно старым объектом, в недавнем прошлом испытывавшем аккрецию химически более молодого вещества. Центральная лучевая концентрация N_2H^+ в нашей модели для

$t = 8 \cdot 10^4$ лет согласуется со значением, приводимым в [50], однако заметное вымораживание действительно начинается на временах $t > 10^5$ лет. Примечательно то, что для получения хорошего согласия модели с наблюдениями, нам не потребовалось дополнительных предположений об относительно высоком содержании углерода в облаке [72].

Очевидно, что для детального анализа статуса ТМС-1С необходима детальная модель его структуры и переноса излучения в различных линиях.

Применение модели к исследованию области DR21(OH)M показывает, что она дает адекватные результаты и для более сложных объектов. Хотя модель физической структуры выбрана нами в значительной степени произвольно, она все-таки позволила воспроизвести лучевые концентрации почти 70% молекул в направлении на этот объект. Анализ полученных результатов показывает, что в большинстве случаев расхождение между теоретическими предсказаниями и данными наблюдений связаны не с простотой физической модели, а также с несовершенством используемой сетки химических реакций.

Наше моделирование согласуется с высказываемым в литературе предположением о том, что ядро DR21(OH)M находится на переходной стадии между беззвездным ядром и протозвездным объектом. Анализ эволюции различных компонентов показывает, что в структуре DR21(OH)M соседствуют признаки как первой, так и второй стадии. Лучевые концентрации большинства молекул воспроизводятся как в модели DR, так и в модели DRS. Однако при этом формально лучше оказывается модель DRS, то есть, модель, в которой объект уже начал прогреваться изнутри.

Очевидным направлением совершенствования модели является включение в нее так называемой фазы разогрева (warm-up phase). Расхождение наших результатов с наблюдениями в значительной степени связано с тем, что молекулы присутствуют в нужном количестве, но не в газовой фазе,

а на пылинках. Согласие с наблюдениями может улучшиться, если мы, например, в модели DRS будем использовать в качестве начального химического состава не состав из табл. 1.1, а содержание молекул из модели DR на какой-либо момент времени.

Следует отметить, что нами использован довольно нестрогий критерий согласия, в котором за приемлемое принято расхождение в порядок величины. Этот критерий представляется оправданным с учетом неопределенности пересчета наблюдаемых интенсивностей линий в лучевые концентрации. Однако примененная физическая модель позволяет проводить более обоснованное сравнение, основанное на теоретическом моделировании профилей спектральных линий. Не исключено, что некоторые результаты сравнения с наблюдениями могут при этом измениться. В частности, как отмечено выше, в радиальном распределении CO по облаку в модели DRS имеется два пика — на внешней границе облака и в его центральной области. В лучевую концентрацию они входят с одинаковым весом, однако условия возбуждения линий в двух этих областях сильно отличаются, и поэтому их вклад в интенсивность линии CO(1–0) будет существенно различным. Разрешить эту проблему можно только при помощи моделирования переноса излучения.

1.6. Положения, выносимые на защиту

По результатам первой главы на защиту выносятся следующие положения:

- Разработана методика анализа эволюции сложных органических соединений в протозвездных объектах. С ее помощью молекул в воспроизведены типичных наблюдения областях десятков образования маломассивных (TMC-1) и массивных (DR21(OH)) звезд. Оценены химические возрасты исследуемых объектов. Показано, что содержа-

ние сложных молекул в ТМС-1 не требует предположения о нетипичном содержании углерода.

- Показано, что предполагаемый возраст объекта, определяется не столько простыми, сколько сложными молекулами. По простым молекулам, подобным CO и HCO^+ возраст определить практически невозможно, поскольку их лучевые концентрации со временем практически не меняются.

2. Возможности диагностики эволюционных стадий протозвездного объекта по наблюдениям сложных молекул

Модель “Presta”, используемая в исследованиях, приведенных в Главе 1, достаточно проста. Возникает естественный вопрос, а не приводят ли простые модели к неверным результатам вследствие избыточного упрощения. Для ответа на этот вопрос, было проведено данное исследование. Модель была усложнена учетом важных физических процессов, сопровождающих процесс звездообразования: коллапса и прогрева. Полученные результаты были сравнены между собой. Таким образом был сделан вывод о том, насколько усложнение моделей приводит к различиям в результатах химического моделирования и каковы границы возможностей химического моделирования по определению эволюции физических параметров и текущего состояния протозвездных объектов. Результаты исследования представлены в статье Кочина, О.В., Вибе, Д.З. Возможности диагностики эволюционных стадий протозвездного объекта по наблюдениям сложных молекул // *Астрономический журнал*. — 2015.— Т. 92, № 8. — С. 635 – 645.

Как уже упоминалось во Введении, физические модели, используемые для химического моделирования, могут быть различной степени сложности. Однако, несмотря на развитие возможностей вычислительной техники, многие исследователи по-прежнему используют для моделирования простые модели, даже одноточечные. И эти модели позволяют успешно воспроизводить наблюдаемый молекулярный состав различных по своим характеристикам протозвездных объектов.

Возникает вопрос: почему для воспроизведения молекулярного состава

ва объектов с заведомо очень широким диапазоном физических условий (плотностей, температур, параметров поля излучения) оказывается достаточно одноточечной модели с параметрически заданной эволюцией? Задача, поставленная в данной главе, состоит в том, чтобы определить, насколько усложнение моделей приводит к различиям в результатах химического моделирования.

Одноточечная модель представляет собой вычисление химической эволюции в некоторых усредненных по пространству физических условиях. Это оправдывается тем, что на данном этапе развития наблюдательной техники наблюдаемые данные, получаемые от объекта, также являются усредненными, приходящими от всего объекта без возможности выделить непосредственно излучение от какого-либо его региона. При работе с одномерной моделью это усреднение по радиусу снимается, и, учитывая различия физических условий на различных расстояниях от центра облака, можно определить, насколько важным для расчета химической эволюции оказывается учет тех или иных изменений физической структуры. Также были исследованы границы возможностей химического моделирования по определению эволюции физических параметров и текущего состояния облака. Таким образом, исследование представляет собой теоретическую оценку возможностей диагностики процессов, происходящих в облаке на основе расчета химической эволюции.

2.1. Модель химической эволюции протозвездного объекта, учитывающая прогрев и коллапс

Для проведения данного исследования, модель химической эволюции “Presta”, представленная в Главе 1, раздел 2. была модифицирована. В модель были включены механизмы учета эволюции плотностной и температурной структур объекта (см. ниже). Личный вклад диссертанта в разработку вычислительной модели состоял в программной реализации меха-

низма учета постепенного прогрева облака протозвездой.

Так как в данном исследовании воспроизведение наблюдаемых особенностей конкретного объекта не было основной целью, в качестве физических параметров моделируемого объекта были выбраны параметры, репрезентативные для области массивного звездообразования. Плотности и температуры соответствуют параметрам, успешно использованным в работе [16] для объектов, наблюдаемых как темные инфракрасные облака. Примерным объектом является облако с текущей массой $M = 2.7M_{\odot}$ и плотностью $2 \cdot 10^5 \text{ см}^{-3}$, в котором происходит образование звезды умеренной массы, типа звезд спектрального класса A.

Для проведения исследования нами были рассчитаны три модели в следующих модификациях.

Основная модификация, далее Модель 1, аналогична модели, использованной для проведения исследования описанного в Главе 1: распределение плотности и распределение температуры остаются постоянными на протяжении всего периода химической эволюции. Данные распределения представлены на рисунках: распределение плотности представлено на рис. 2.1, распределение температуры представлено на рис. 2.2. Радиальный профиль температуры строится при помощи модели переноса излучения для облака, которое освещается внешним галактическим полем излучения и внутренним источником (протозвездой) с температурой 1000 K.

Во второй модификации, далее Модель 2, рассматривается модель с учетом коллапса: химическая эволюция начинается в разреженном облаке с плотностью 10^4 см^{-3} . В течении первых 50 тысяч лет облако коллапсирует до состояния, являющегося начальным для основной модификации. Впоследствии считается, что его плотность не меняется. Температурная структура облака соответствует основной модификации и не изменяется на протяжении всей эволюции.

В третьем случае, далее Модель 3, рассматривается как коллапс, так

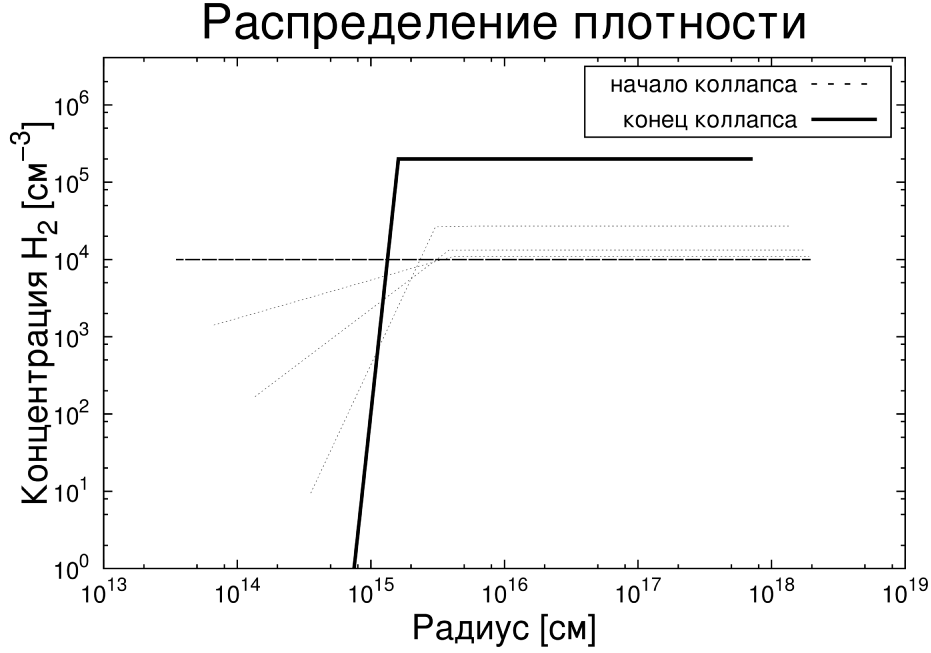


Рис. 2.1. Распределение плотности. Штриховой линией показано начальное распределение плотности в облаке на момент начала коллапса. Непрерывной линией показано конечное распределение плотности на момент завершения стадии коллапса. Данное распределение является начальным для Модели 1. Пунктирными линиями показаны промежуточные распределения плотности в облаке.

и прогрев: в данной модели за стадией коллапса, изменяющей распределение плотности, при постоянном распределении температуры, следует стадия прогрева, изменяющая температурную структуру при постоянном распределении плотности. Тепловая структура изменяется по закону $\propto t^2$ [73] для каждой из точек, постепенно формируя распределение, представленное на рис. 2.2, что соответствует постепенному разогреву протозвезды с температуры 1000 K до 10000 K.

2.2. Результаты

Различия моделей в нашем исследовании приводят к некоторым принципиальным различиям в физических условиях. В Модели 3 температура внутренних областей облака постепенно растет и на поздних временах эволюции сильно отличается от температуры внешних слоев. Исследование

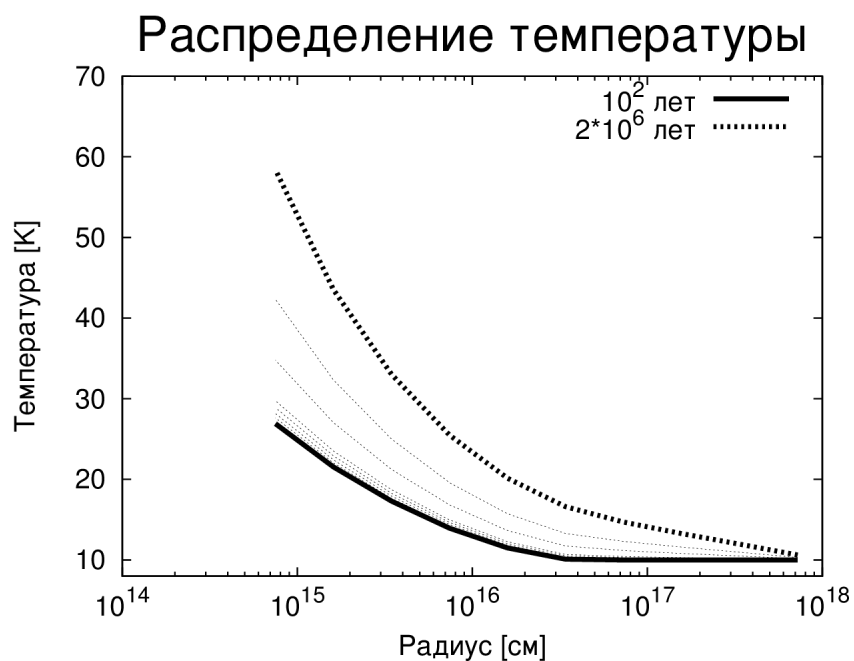


Рис. 2.2. Распределение температуры. Непрерывной линией показано начальное распределение температуры на момент начала стадии прогрева в Модели 3. Данное распределение является постоянным для Модели 1 и Модели 2. Штриховой линией показано итоговое распределение температуры в облаке на момент завершения стадии прогрева в Модели 3. Пунктирными линиями показаны промежуточные распределения температуры в облаке в Модели 3.

Таблица 2.1. Средняя температура в различных регионах облака

Возраст, лет	Центральный, К	Внутренний, К	Внешний, К
0	26.9	14	10
6.6(+4)	27	14.1	10
2.5(+5)	28.1	14.8	10.5
5(+5)	29.7	17	10.7
1(+6)	42.3	26	13
2(+6)	152.7	61	17

распределения температуры показывает, что прогрев эффективен только в ограниченной внутренней части облака (рис. 2.2) и не сказывается на периферийных областях, затрагивая область радиусом 10^{16} см в облаке радиусом 10^{18} см, то есть не более 10^{-6} полного объема облака. Изменение во времени средних температур для центрального (непосредственно возле звезды), внутреннего (горячего) и внешнего (холодного) регионов представлено в таблице 2.1.

Сравнение эволюций лучевых концентраций, полученных в различных моделях, показывает, что для абсолютного большинства случаев различий в содержаниях для моделей с учетом и без учета стадии прогрева не наблюдается вообще, у незначительной доли компонентов наблюдаются слабые различия на самых поздних временах, когда температура в центральной области превосходит 100 К. Так по виду кривой эволюции лучевых концентраций (рис. 2.3) оказывается невозможно определить, происходит ли в облаке процесс прогрева.

В моделях с учетом коллапса среда достаточно долгое время находится в разреженном состоянии, что уменьшает вероятность столкновения частиц и приводит к низкому темпу химической эволюции. Эволюция лучевых концентраций компонентов в моделях, учитывающих коллапс, отличается от эволюции в моделях без учета коллапса, однако лишь на ранних временах, сравнимых со временем коллапса. На более поздних временах

различия постепенно сглаживаются.

При взгляде на графики обнаруживается особенность — эволюция в моделях с учетом коллапса, по сути, повторяет эволюцию в модели без учета коллапса, только на более ранних временах. Действительно, если сдвинуть графики эволюции Модели 1 на 20 тысяч лет, все три графика становятся практически неотличимы, как показано на рис. 2.4. Видно, что химическая эволюция, протекавшая в разреженной среде коллапсирующего облака в течении 50 тысяч лет, вносит вклад сравнимый с тем, что вносит химическая эволюция, протекавшая в плотной среде в течении 20 тысяч лет.

Для проверки того, является ли это случайным совпадением, или такова общая тенденция, было проведено дополнительное моделирование, в котором фаза коллапса длилась не 50 тысяч лет, а 100 тысяч лет. Моделирование показало, что аналогичные результаты в разной степени проявляются и для этого времени коллапса. Таким образом, выявленная в основном исследовании особенность может считаться общей тенденцией.

Еще более примечательной особенностью графиков является наличие на них области, в которой все три линии практически сливаются в одну, а различия в содержаниях между разными моделями в периоде времени от 100 до примерно 500 тысяч лет для большинства компонентов не превышают предел точности. Это значит, что существует некий период, в котором химическая эволюция не зависит от предшествующей истории, а определяется исключительно возрастом облака и распределением плотности в нем.

Протозвезда способна прогреть только внутреннюю часть облака, что приводит к тому, что условия в большей части облака остаются неизменными. Так как облако практически однородно и плотность его высока, в нем быстро устанавливается равновесный химический состав, одинаковый вследствие схожести условий в различных точках. Установившись, равновесный химический состав не позволяет определить путь, по которому шло

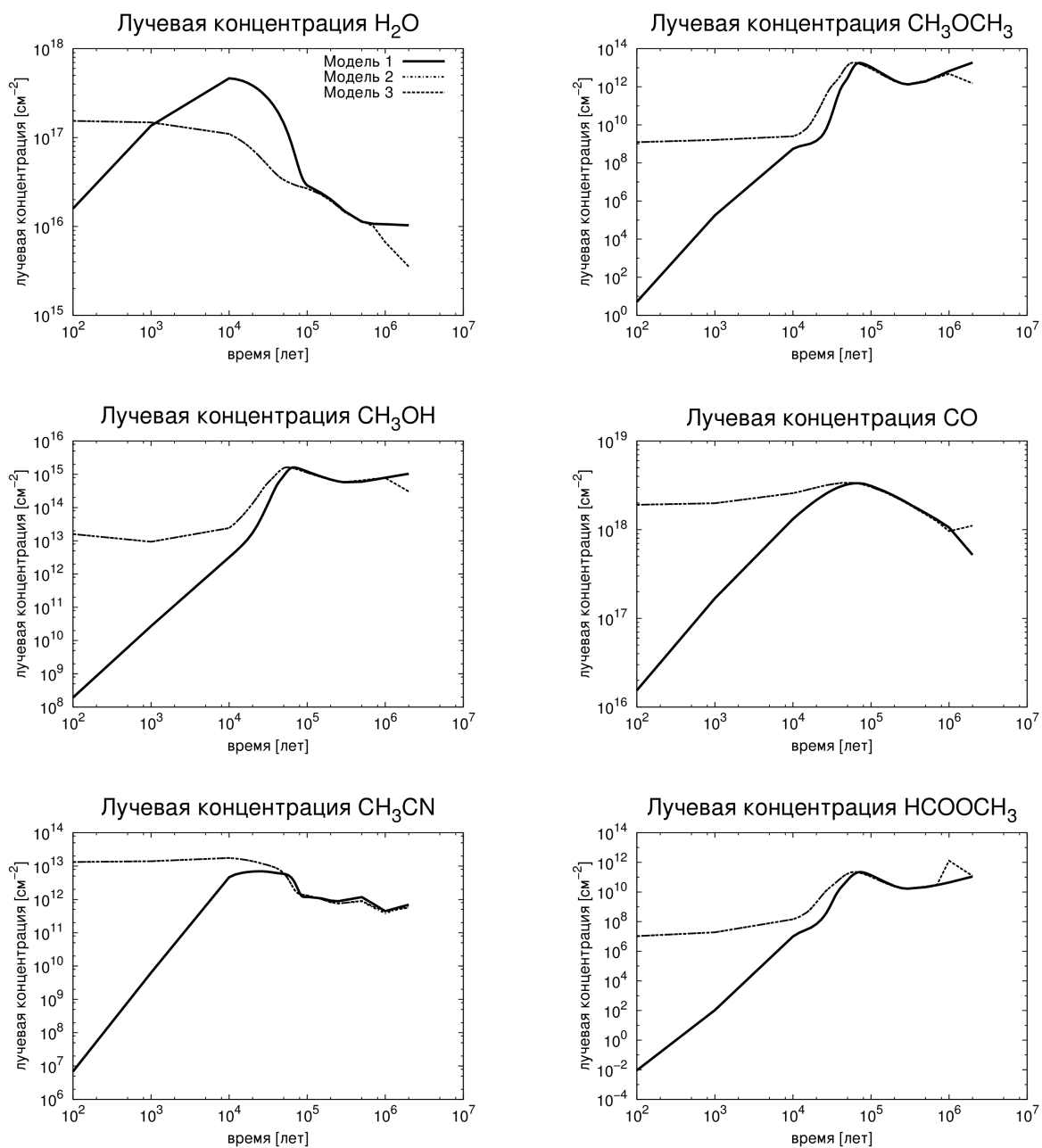


Рис. 2.3. Эволюция лучевых концентраций.

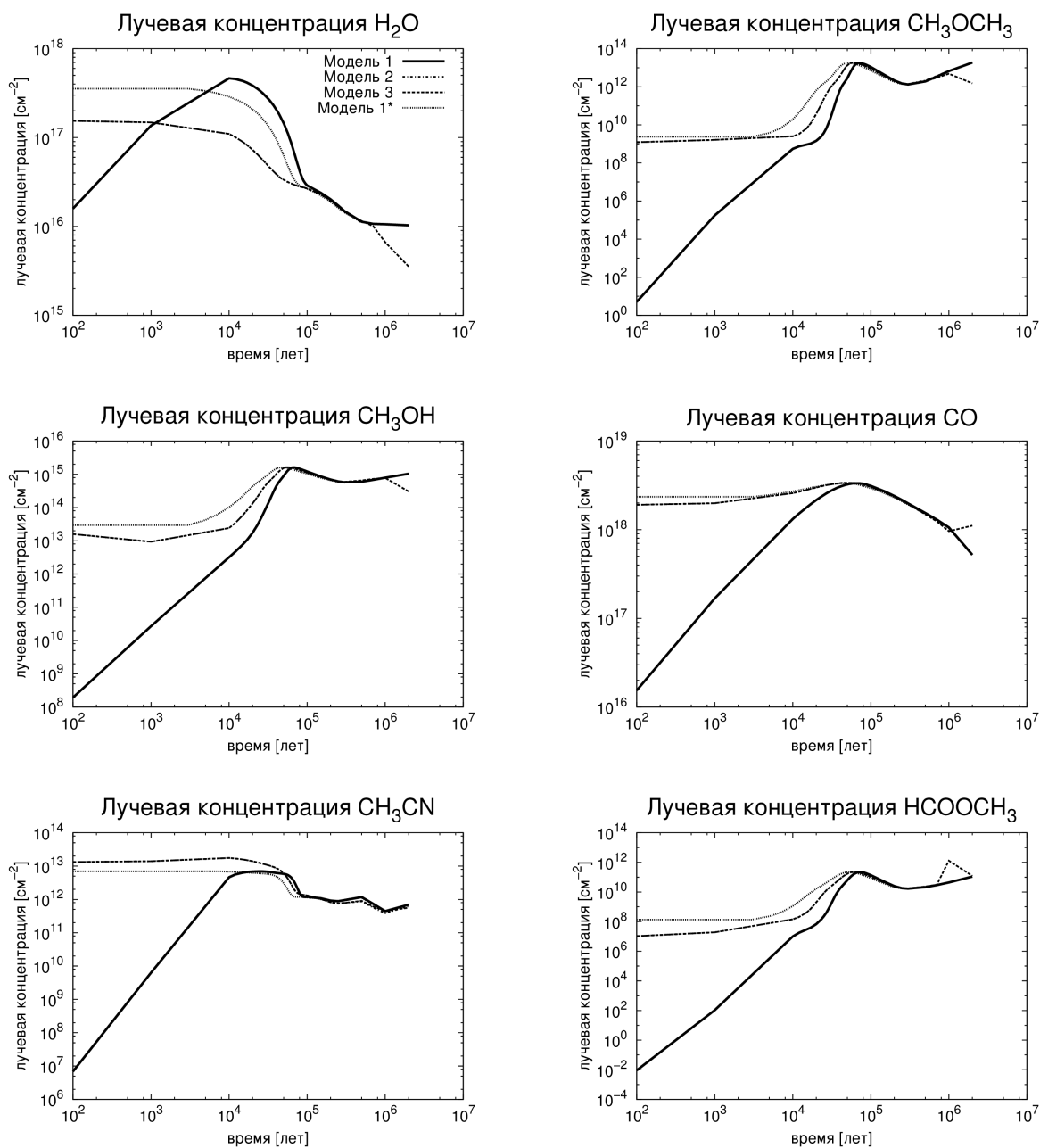


Рис. 2.4. Эволюция лучевых концентраций с учетом сдвига во времени.

облако в процессе своей эволюции, приведшей к данному состоянию. Этот химический состав определяется непосредственно текущими физическими параметрами. Чтобы оценить вклад высоких плотностей в установление равновесного химического состава и, как следствие, наблюдаемых эффектов, было проведено два дополнительных исследования. В первом из них была в 5 раз увеличена температура звезды с целью повысить влияние протозвезды на плотное облако. Во втором исследовании была рассчитана эволюция для облака с протозвездой с основными параметрами и плотностями заниженными на два порядка. Результаты исследований представлены на рис. 2.5 и 2.6 и отражают все те же тенденции, что и графики для основных моделей.

2.3. Моделирование интенсивностей линий

Несмотря на количественно равное содержание различных компонентов в облаке для разных моделей, наблюдатель на Земле возможно сможет различить состояния облака, так как лучевые концентрации не наблюдаются непосредственно, а получаются путем обработки наблюдаемых спектральных линий. Интенсивность же линии зависит не только от содержания компонента, но и от условий возбуждения в заданной точке облака. А условия возбуждения во внутренних регионах облаков в различных моделях будут различны. Для оценки различий, проявляющихся в молекулярном спектре на период схождения (50 тысяч лет – 1 миллион лет), было проведено моделирование спектральных линий при помощи программного кода переноса излучения в не-ЛТР условиях RADEX [74]. Для ряда молекул (CH_3CN , $\text{CH}_3\text{OH-A}$, $\text{CH}_3\text{OH-E}$, $\text{o-H}_2\text{O}$, $\text{p-H}_2\text{O}$) были рассчитаны температуры излучения. Так как в текущей версии кода “Presta” изомеры не разделены, то для моделирования линий лучевые концентрации молекул в различных состояниях были пересчитаны по методам, описанным в работах [75] для воды H_2O и [76] для метанола CH_3OH . В качестве темпе-

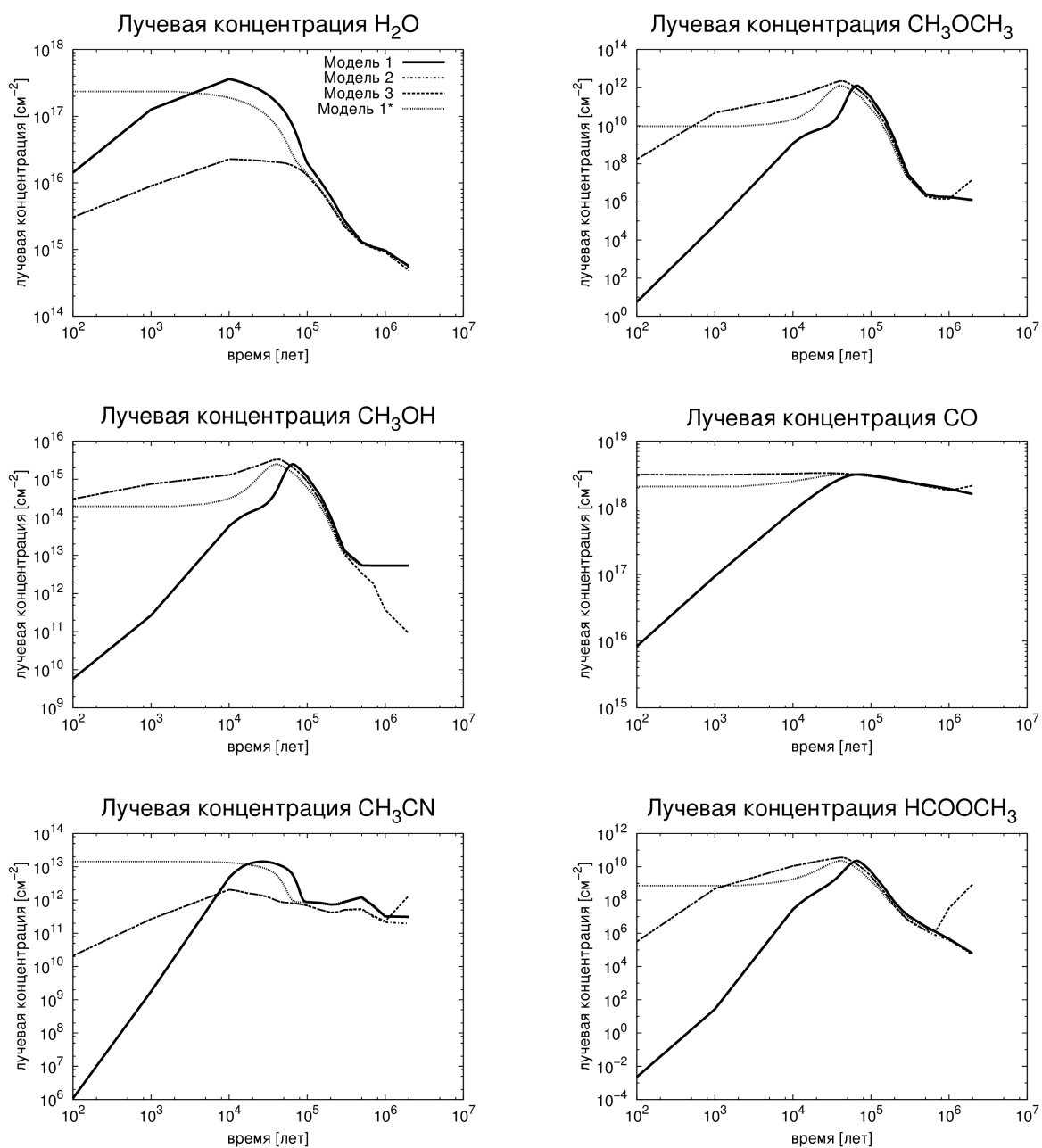


Рис. 2.5. Эволюция лучевых концентраций в облаке с повышенной температурой протозвезды.

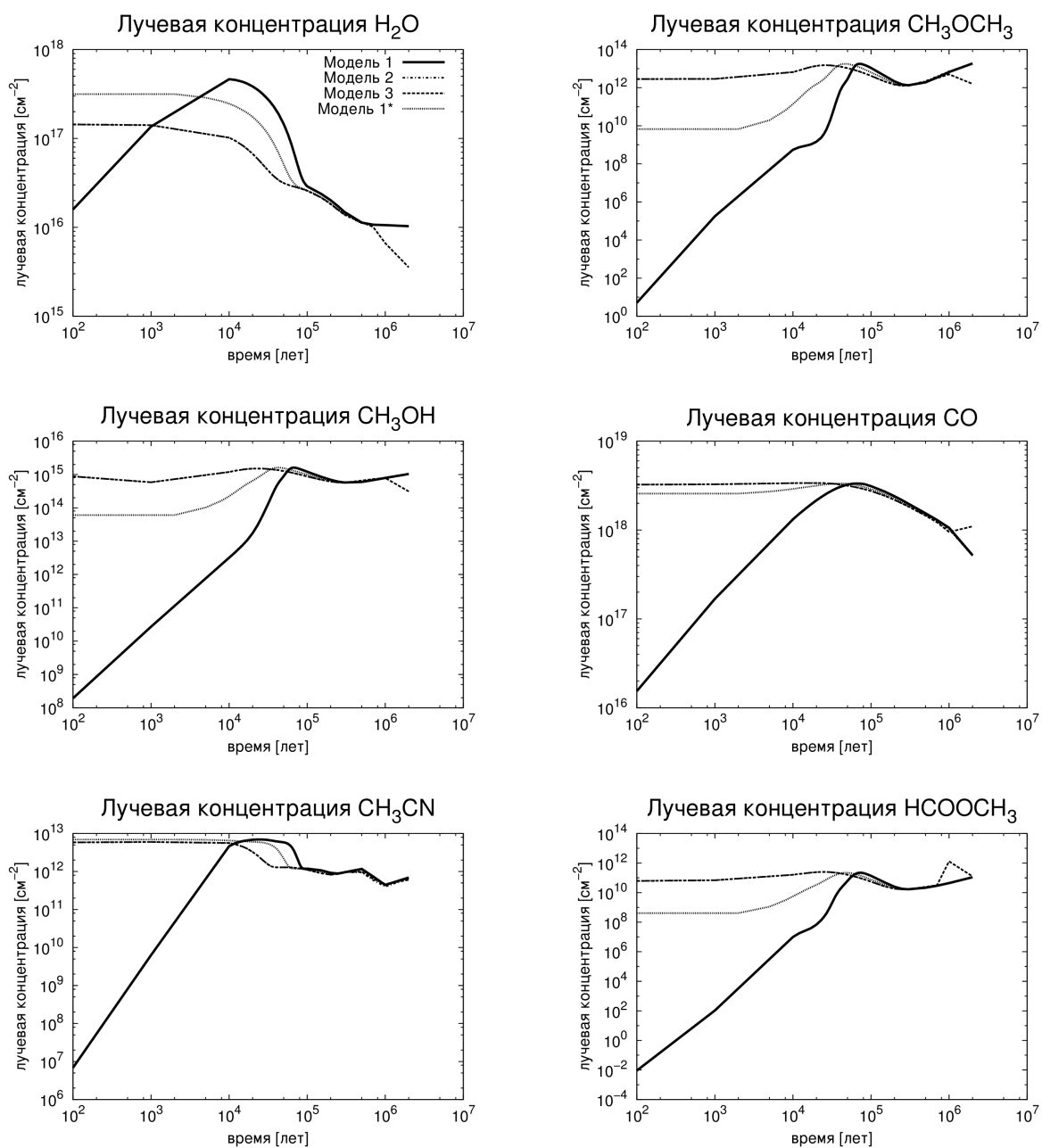


Рис. 2.6. Эволюция лучевых концентраций в облаке с пониженной плотностью.

ратур для модели с учетом как коллапса, так и прогрева, задавались температуры внутреннего региона, представленные в таблице 2.1. В качестве температуры фона из таблицы 2.1 брались температуры внешнего региона. Температуры для моделей как без учета коллапса и прогрева, так и с учетом коллапса, но без учета прогрева, соответствуют значениям на начальный момент времени в таблице 2.1. Результаты моделирования линий для заданного временного периода представлены на рис. 2.7.

Как показывают графики, различия в условиях возбуждения незначительно сказались на вариации интенсивности линий ацетонитрила CH_3CN . Эволюции интенсивности его линий в общем случае повторяют друг друга, следуя эволюции содержаний молекулы во внутреннем регионе облака. Однако различия в условиях возбуждения привели к изменениям в интенсивности линий метанола и воды. Это отчасти связано также с тем, что отношения лучевых концентраций их изомеров зависят от температуры, потому зависимость интенсивности линий от условий в облаке, то есть температуры, усиливается. Однако основной вклад в изменение интенсивности дает именно изменение температуры в облаке, потому даже будучи перераспределенными по изомерам, молекулы метанола и воды в модели с коллапсом и прогревом дают линии значительно большей интенсивности на поздних временах эволюции, чем в случаях, когда внутренний регион облака остается холодным. Интенсивности могут различаться более чем в два раза (метанол), что может быть заметно наблюдателю. В случае воды различия достигают нескольких порядков, однако температуры излучения для воды крайне малы.

2.4. Обсуждение и выводы

По результатам исследования можно сделать вывод, что усложнение моделей не вносит существенного вклада в количественное изменение химического состава плотной оболочки вокруг протозвезды. Спустя несколь-

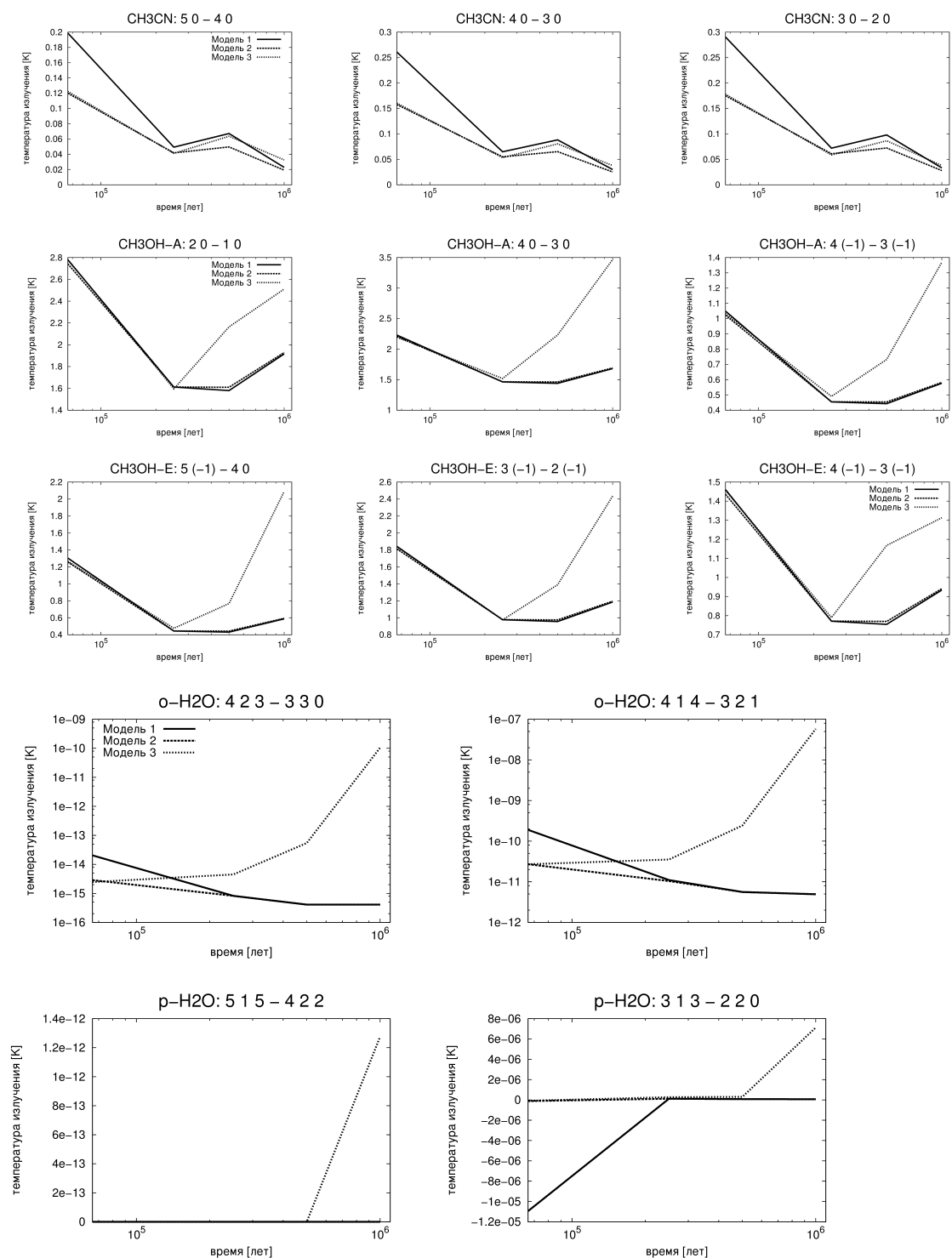


Рис. 2.7. Моделирование интенсивности линий ацетонитрила, метанола и воды.

ко десятков лет с начала эволюции в облаке устанавливается равновесный химический состав, не чувствительный к изменениям, вносимым усложнениями моделей. Однако несмотря на одинаковые содержания молекул в моделях различных сложностей, существует способ определить физические условия в облаке, опираясь на наблюдения спектральных линий. Существуют компоненты, интенсивности линий которых особенно чувствительны к условиям возбуждения даже в холодном облаке. Такие компоненты могут служить индикаторами процессов, происходящих в облаке. Одним из таких индикаторов может являться метанол, что делает наблюдения метанола особо важными для диагностики состояния региона звездообразования.

В данном исследовании не варьировался ряд параметров, которые, по всей вероятности, не влияют на результаты исследования принципиально. К ним относятся такие параметры, как масса облака, внешнее поле излучения и особенности распределения плотности. Наше исследование затронуло изучение чувствительности химической эволюции к таким усложнениям моделей как прогрев и коллапс, однако существует ряд усложнений, в нашей работе не затронутый. Так в данной работе не была исследована чувствительность к учету в модели динамической эволюции.

Отсутствие чувствительности к усложнению физических параметров модели не относится к усложнению химических. Напротив, в следующей главе продемонстрировано, что введение дополнительного населения пыли приводит к существенным изменениям хода эволюции. В данной работе участвовали компоненты, включающие только основные изотопы элементов. Включение изотопов и изотопомеров в качестве отдельных компонентов, а также учет сложности пылевой составляющей могут привести к повышению чувствительности моделей, что может являться предметом отдельного исследования. Таким образом, чувствительность модели определяется уточнениями химических параметров в гораздо большей степени, чем физических.

2.5. Положения, выносимые на защиту

По результатам второй главы на защиту выносятся следующее положение:

Исследована возможность диагностики длительности различных этапов протозвездной эволюции (коллапса, начального прогрева протозвездой) по наблюдениям сложных органических молекул. Показано, что этап коллапса влияет лишь на самую раннюю эволюцию органических молекул. Различия в лучевых концентрациях между моделями с разной продолжительностью коллапса в период от 100 до 500 тыс. лет для большинства компонентов не превышают предела точности. Наибольшей чувствительностью к наличию фазы прогрева обладает излучение метанола.

3. Пылинки различных размеров и химическая эволюция протозвездных объектов

3.1. Химические процессы на пылинках

По результатам исследования, представленного в Главе 2, был сделан вывод, что вклад в химическую эволюцию дает учет не физических процессов, а именно химических. С целью улучшения модели в этой главе в нее было добавлено второе население пыли, мелкие пылинки, как и классические пылинки, участвующие во множестве астрохимических процессов. Для понимания механизмов влияния и оценки вкладов того или иного механизма, соискателем был разработан анализатор скоростей, позволяющий оценить вклад той или иной реакции в суммарное изменение содержания компонента в любой момент времени в любой точке облака. В данной главе представлены результаты данного исследования. По итогам работы опубликована статья Кочина О. В., Вибе Д. З. Пылинки различных размеров и химическая эволюция протозвездных объектов // *Астрономический журнал*. — 2014. — Т. 91, №4. — С. 287 – 298.

Давно известно, что использование в астрохимических моделях только газофазных реакций не позволяет воспроизвести содержание многих молекул, наблюдаемых в молекулярных облаках, поскольку в их эволюции ключевую роль играют химические реакции на поверхностях космических пылинок. Однако корректное описание вклада поверхностных реакций является непростой задачей, так как в них важную роль играют, например, структура поверхности пылинки, ее химический состав, размер и прочие факторы, трудно поддающиеся учету.

Еще одна сложность, связанная с вкладом поверхностных реакций

в эволюцию химического состава газовой фазы, состоит в необходимости учитывать механизмы обмена молекулами между газом и пылинками. Эффективность вымерзания молекул на пыль обычно учитывают при помощи коэффициента прилипания, то есть, вероятности того, что молекула из газовой фазы, столкнувшись с пылинкой, окажется адсорбированной. В литературе встречаются значения этого параметра от 0.1 до 1 [77]. Сложность определения коэффициента прилипания состоит в малой изученности особенностей рельефа поверхности реальных пылинок, а также в необходимости учета их собственной эволюции. Слипание и разрушение пылинок способно серьезно изменить их способность адсорбировать молекулы не только из-за изменяющегося сечения, но и из-за изменения свойств поверхности.

За возврат поверхностных компонентов в газовую фазу отвечает несколько механизмов десорбции, зависящих от множества факторов: температуры пылинки, поля излучения, космических лучей, энергии, выделяющейся в ряде поверхностных реакций, и пр. Тем не менее, задача описания поверхностной химии в последнее время привлекает все большее внимание исследователей, занимающихся проблемой химической эволюции дозвездных, протозвездных и протопланетных объектов (см. напр. [78, 79]).

Дополнительные затруднения в корректном учете поверхностной химии возникают из-за того, что сами пылинки не являются непрерывной и однородной средой, подобной газу. Поэтому для моделирования поверхностных процессов необходимо, вообще говоря, использовать подходы, основанные на решении управляющего уравнения [80]. Однако эти методы весьма ресурсоемки, поэтому для решения практических задач до сих пор широко применяется метод, основанный на решении для поверхностных реакций таких же балансных уравнений, что применяются и для моделирования газофазных реакций [81]. В подобных исследованиях обычно предполагается, что пылинки имеют один фиксированный размер, как правило, 0.1 мкм.

При описании поверхностных реакций посредством балансных уравнений это упрощение несущественно, поскольку в данном случае важна лишь суммарная площадь пылинок в единице объема. Однако имеются факторы, зависящие не от суммарной площади, а от количества пылинок в единице объема, а также от их распределения по размерам. Для описания распределения пылинок по размерам предложено несколько эмпирических выражений. Классическое распределение MRN [82] было получено на основе интерпретации наблюдений экстинкции света звезд, проходящего сквозь диффузные облака. Особенности кривой поглощения в распределении MRN сопоставлены с двумя различными населенными пылью — силикатными и графитовыми пылинками — с общим видом распределения $dn(a) \propto a^{-3.5}$. Впоследствии это распределение было усовершенствовано и расширено в работе [83], где представлены отдельные распределения по размерам для силикатных (WDs) и графитовых (WDc) пылинок.

Попытки корректно учесть различия в размерах пылинок предпринимались лишь в нескольких астрохимических моделях. В частности, в работах [84, 85] исследовалось влияние эволюционных изменений в распределении пылинок по размерам на молекулярный состав протопланетного диска на ранних этапах формирования планетной системы. При этом собственно *распределение* учитывалось лишь при вычислении коэффициентов поглощения, необходимых для расчета скоростей фотореакций. При расчете скоростей поверхностных реакций считалось, что пылинки имеют один и тот же характерный размер, определяемый текущей формой распределения $n(a)$.

Наиболее детально роль распределения пылинок по размерам была рассмотрена в работе [24], посвященной исследованию химической эволюции молекулярного облака. В этой работе населения пыли были дискретизированы, а не заданы функцией распределения, как в работах [84, 85]. Всего рассматривалось по пять населений пыли для каждого из распреде-

лений MRN, WDs и WDc. Рассчитанные модели сравнивались с моделями с “классической” пылью. Также в этой работе впервые учитывалось влияние роста пылинок на эволюцию содержаний различных компонентов. Авторы пришли к следующим выводам: если эволюция самих пылинок не принимается в расчет, относительное содержание поверхностных компонентов на пылинках различных размеров пропорционально вкладу этих пылинок в общую площадь поверхности пыли. Иными словами, для данного распределения пылинок по размерам большая часть молекул сосредоточена на пылинках, вносящих основной вклад в суммарную поверхность. Однако эта пропорциональность соблюдается лишь для определенных времен, поскольку в моделях с разными распределениями пыли по размерам эволюция поверхностных содержаний происходит несколько по-разному.

В работе [24] не были учтены некоторые важные аспекты различий пылинок по размерам. Во-первых, температура всех компонентов среды — газа и всех компонентов пыли — считалась равной 10 K. Однако температура пылинок различных размеров может сильно отличаться в силу эффектов стохастического нагрева мелких пылинок [86]. Во-вторых, не учитывалось, что от принятого распределения пылинок по размерам зависит количество заряженных пылинок, участвующих в *газофазных* реакциях диссоциативной рекомбинации. Наконец, если рассматривать не одноточечную (0D), а многоточечную (1D) модель, от распределения пылинок по размерам будет зависеть коэффициент поглощения, а следовательно, скорости фотореакций в рассматриваемом объекте. Исследованию этих факторов посвящена данная глава.

В диссертационной работе представлены результаты моделирования химической эволюции с учетом присутствия пыли различных населений, различающихся не только размерами и массовой долей, но и температурами. Получены данные об изменении лучевых концентраций различных молекул во времени. Сравниваются два расчета: химической эволюции с

Таблица 3.1. Параметры пылинок различных населений

Параметр	Силикатные	Графитовые
	пылинки	пылинки
Плотность, г см^{-3}	3.5	1.8
Радиус, см	2(−5)	3(−7)
Массовая доля	0.77	0.23
Концентрация ячеек, см^{-2}	1.5(+15)	1.5(+15)

учетом присутствия одного населения “классической” пыли и химической эволюции с учетом присутствия двух населений пыли.

3.2. Модель протозвездного объекта

Основное отличие модели, использованной в данной главе, от модели описанной в Главе 1, состоит в том, что теперь в ней реализован учет нескольких населений пыли. Технически это сделано путем создания аналогов поверхностных компонентов для каждого из населений пыли. Скорости поверхностных реакций, а также скорости аккреции и десорбции рассчитываются индивидуально для каждого населения пыли в каждой точке облака с учетом различия температур пылинок и их массовой доли. Коэффициент прилипания, как правило, считается одинаковым для всех населений и равным 0.3 для всех нейтральных компонентов за исключением H, для которого коэффициент рассчитывается отдельно, и H_2 и He, для которых он принят равным нулю.

Модель реализована так, что допускает работу с любым количеством компонентов пыли. В данной работе представлены результаты моделирования с учетом двух населений: “крупных” и “мелких” пылинок (модель MD), поскольку основной задачей является качественная оценка вклада пылинок различных размеров. Физические параметры компонентов пылевой среды различных населений представлены в таблице 3.1.

Температуры населений пыли рассчитывались при помощи модели

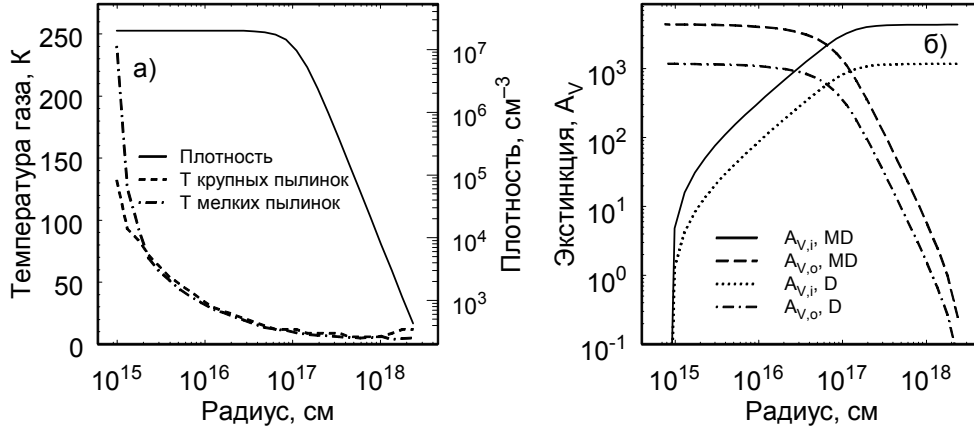


Рис. 3.1. Слева — плотность газа и температура пыли различных населений. Справа — оптическая экстинкция для внутреннего ($A_{V,i}$) и внешнего ($A_{V,o}$) излучения в моделях с одним (D) и двумя (MD) населениями пыли.

переноса излучения с учетом стохастического нагрева пылинок различных размеров и химических составов [86] под воздействием внешнего и внутреннего поля излучения. Температурные профили для данной работы рассчитаны для внешнего поля с температурой излучения 20000 K и дилуцией 10^{-16} , что близко к параметрам среднего межзвездного поля. Поле, нагревающее облако изнутри, соответствует излучению абсолютно черного тела с температурой 10000 K. Профили температуры представлены на рис. 3.1. Температура газа считается равной температуре крупных пылинок.

Основной акцент в работе делается на оценке влияния на химическую эволюцию пылинок, различающихся размерами и температурами, потому ряд факторов, например, эволюция физической структуры облака, а также рост и разрушение пылинок, не учитывались. Помимо модели MD рассматривается модель с единственным “классическим” населением пыли (модель D), параметры которой соответствуют первому столбцу таблицы 3.1 при массовой доле, равной 1.

При вычислении оптической экстинкции в модели MD учитывалось, что отношение Q_{abs} сечения поглощения пылинки к ее геометрическому сечению зависит от размера. Для крупных пылинок принято значение $Q_{\text{abs}} = 1$, для мелких — 0.1 [87].

3.3. Результаты

В рамках нашей модели введение населения мелких пылинок с сохранением полной массовой плотности пыли в среде приводит к четырем качественным изменениям. Во-первых, возрастает суммарная площадь поверхности пылинок в единице объема, и, как следствие, увеличивается число ячеек, доступных для реагентов поверхностных реакций. Во-вторых, за счет добавления значительного количества мелких частиц возрастает полная числовая концентрация пылинок. В-третьих, разница в температурах крупных и мелких пылинок приводит к различиям в протекании поверхностных реакций. В-четвертых, изменяются характеристики поглощения пылью УФ-излучения, которое является ключевым фактором для ряда химических реакций в областях облака, подверженных воздействию внешнего поля излучения и поля излучения протозвезды. Рассмотрим перечисленные эффекты подробнее.

Увеличение суммарной площади пылинок может приводить к ряду последствий, например, к более интенсивному вымораживанию компонентов газовой фазы на пылинки и к повышению эффективности поверхностных процессов. В рамках принятой модели увеличение площади за счет введения второго населения пылинок оказалось значительным. Суммарная площадь крупных пылинок в обеих моделях (D и MD) примерно одна и та же; площадь мелких пылинок превышает ее почти в 40 раз.

Второй фактор — увеличение числа пылинок — может приводить к изменению баланса процессов диссоциативной рекомбинации. Количество пылинок, то есть, потенциальных носителей заряда, в модели с двумя населением пыли увеличено на пять порядков. Это, естественно, может привести к различиям в модельном содержании, в первую очередь, ионов и радикалов, а опосредованно и в содержаниях нейтральных молекул, связанных с ионизованными компонентами посредством реакций разрушения

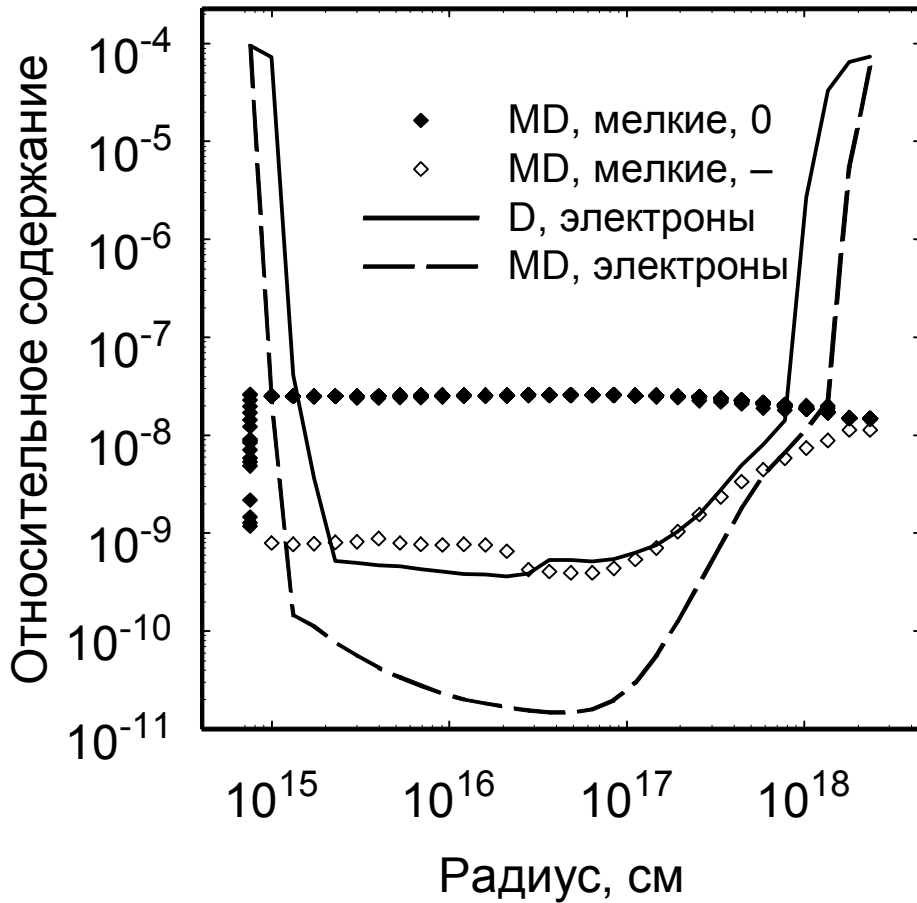


Рис. 3.2. Относительное содержание мелких пылинок и электронов на момент времени 10^5 лет.

или образования. На рис. 3.2 показано относительное содержание мелких пылинок в модели MD и электронов в моделях D и MD на момент времени 10^5 лет. Видно, что в промежуточной области облака в модели MD основным реагентом реакций диссоциативной рекомбинации являются нейтральные мелкие пылинки, содержание которых существенно превосходит содержание электронов. Напомним, что в используемой модели нейтральные пылинки участвуют в реакциях диссоциативной рекомбинации, приобретая единичный положительный заряд.

Третий фактор — влияние различий в температурах пылинок на особенности протекания поверхностных процессов, а также десорбции. В формализме [81], использованном в данной работе, скорости поверхностных реакций определяются подвижностью реагентов, а она, в свою очередь,

экспоненциально зависит от температуры пылинки, так что даже незначительные вариации в нагреве пылинок могут приводить к заметным последствиям.

Четвертый фактор — экранирование УФ-излучения за счет поглощения фотонов пылинками — влияет как на интегральную интенсивность УФ-излучения, так и на форму спектра, поскольку зависимость коэффициентов поглощения и рассеяния от частоты зависит от размера пылинок. Эти изменения затрагивают содержание компонентов, участвующих в фотореакциях в качестве реагентов или продуктов.

В результате моделирования нами получены данные об изменении лучевых концентраций молекул как в газовой фазе, так и на каждом из населений пыли в отдельности на протяжении $3 \cdot 10^5$ лет. Сравнение результатов моделирования химической эволюции с учетом одного и двух населений пыли показывает, что примерно для трети компонентов введение второго населения пыли оказывается не критичным. В их число входят, например, CO_2 , CO , HCO^+ , H_3O^+ , HF . Для них как в момент времени 10^5 лет (характерный возраст объектов, исследованных в Главе 1), так и в более ранние времена лучевые концентрации в моделях D и MD отличаются менее чем в три раза.

Для остальных двух третей компонентов добавление в модель мелких пылинок оказывается более значительным фактором. На протяжении большей части расчетного времени их лучевые концентрации в моделях D и MD отличаются более чем в три раза (здесь и далее в расчет принимаются только компоненты с лучевыми концентрациями выше 10^{10} см^{-2} хотя бы в одной из моделей и не рассматриваются молекулы с малым содержанием).

Влияние нескольких населений пыли на содержания компонентов проявляется по-разному, поэтому группу чувствительных компонентов можно, в свою очередь, разделить на подгруппы: компоненты, содержание которых увеличилось как суммарно, так и в газовой фазе (например,

C_2O и C_2O^+), компоненты, которые в модели MD сохранили то же суммарное содержание, но иначе распределились между газом и различными населенными пылью (например, H_2O_2 , H_2S), и компоненты, которых стало суммарно меньше как в газе, так и на пылинках (N_2O).

Для анализа причин различий в содержании компонентов между моделями рассмотрим ряд молекул и ионов, являющихся репрезентативными представителями соответствующих групп.

Молекула C_2O является представителем соединений, лучевая концентрация которых при добавлении второго населения пыли увеличивается (хотя и в разной степени) как в газе, так и на поверхности пылинок. Анализ радиальных профилей содержания молекулы (рис. 3.3 а и б) указывает, что причину следует искать в особенностях химических реакций во внешней области облака, поскольку именно там содержание молекулы в модели MD превосходит ее содержание в модели D и именно эта область дает максимальный вклад в лучевую концентрацию. Во внешней области модели D реакции разрушения молекулы C_2O ультрафиолетовыми фотонами доминируют над реакциями образования, скорость самой быстрой из которых — реакции $\text{HCO} + \text{C}$ — в момент времени порядка 10^5 лет на несколько порядков уступает скорости реакции фотодиссоциации. В модели MD содержание молекулы во внешней области падает из-за фотодиссоциации не так сильно. Это связано с более высокими значениями A_V , обеспечиваемыми мелкими пылинками. Реакции разрушения фотонами, индуцированными космическими лучами, в момент времени 10^5 лет по скорости превосходят реакции образования не более чем на 2 порядка. На более поздних временах реакции разрушения уравниваются процессами десорбции с пылинок и новым каналом образования — реакцией диссоциативной рекомбинации HC_2O^+ при столкновении с нейтральной или отрицательно заряженной пылинкой второго населения.

Второй регион с повышенным содержанием молекулы C_2O в моде-

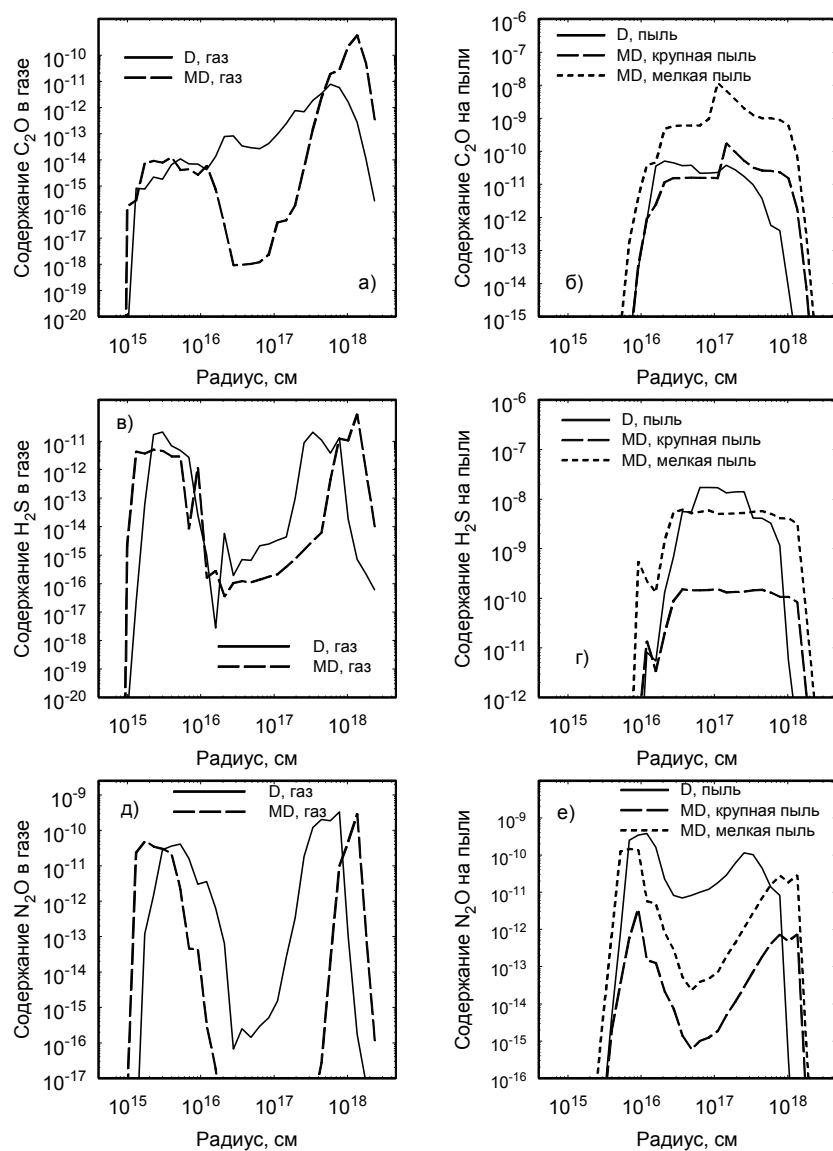


Рис. 3.3. Радиальные профили содержания некоторых компонентов на момент времени 10^5 лет.

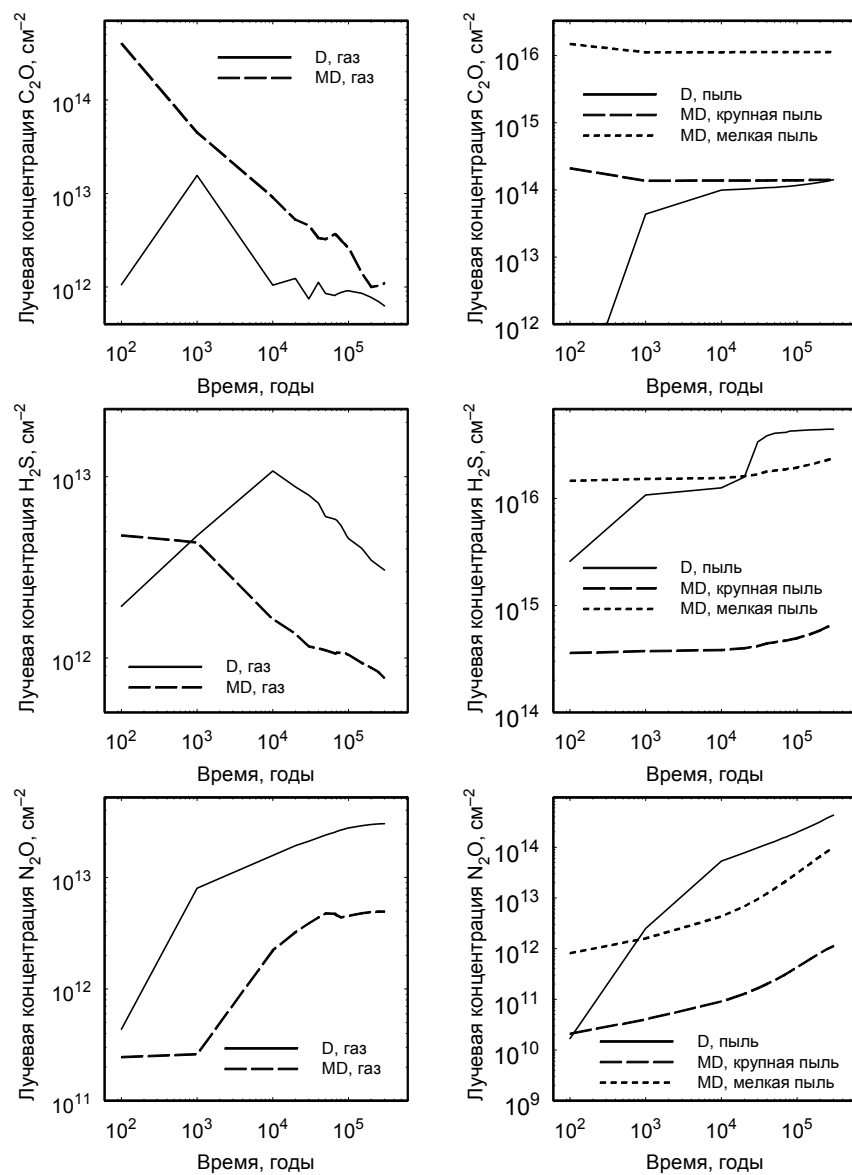


Рис. 3.4. Эволюция лучевых концентраций компонентов для моделей с одним населением пыли (D), и с двумя (MD).

ли MD, — внутренняя область. Здесь наблюдается та же ситуация: реакции разрушения ультрафиолетовыми фотонами, обуславливающие резкое уменьшение содержания молекулы в модели D, в модели MD не являются доминирующими. Как следствие, содержание падает не так значительно. Однако слой более высокого содержания C_2O в модели MD очень узок и не вносит существенного вклада в лучевую концентрацию.

Интересен промежуточный регион, в котором содержание C_2O в модели D оказывается значительно выше содержания этой молекулы в модели MD, в отличие от центра и внешней оболочки. В защищенном от ультрафиолетового излучения регионе доминируют те же реакции разрушения, что и в модели MD. Однако в модели MD открываются новые каналы вывода молекулы из газовой фазы, а именно реакция с ионом H_3^+ , содержание которого в модели MD больше на один-два порядка по сравнению с моделью D, а также значительная аккреция на пылинки второго населения. Вымерзание C_2O на пылинки второго населения обеспечивает высокое содержание этой молекулы в твердой фазе модели MD. Содержание C_2O в мантиях крупных пылинок на протяжении большей части расчетного времени практически одно и то же в обеих моделях. Ее содержание на мелких пылинках оказывается существенно (на два порядка) более высоким.

Молекула H_2S — одно из соединений, которые в модели MD сохранили то же суммарное содержание, что и в модели D, однако иначе распределились между компонентами среды, главным образом, между пылинками первого и второго населения. На рис. 3.4 в и г видно, что на протяжении большей части расчетного времени лучевая концентрация H_2S в газовой фазе модели MD ниже соответствующей лучевой концентрации в модели D. В момент около 10 тыс. лет различие лучевых концентраций достигает почти порядка величины. Это отличие практически не влияет на суммарное содержание H_2S , так как в обеих моделях эта молекула, как и C_2O , в значительной степени сосредоточена не в газе, а на пыли. Однако

в данном случае есть важное отличие. Поверхностное содержание молекулы C_2O в модели MD существенно возросло за счет молекул, вошедших в мантии мелких пылинок. Поверхностное содержание молекулы H_2S в модели MD почти не изменилось, но если в модели D она в основном была сосредоточена на крупных пылинках, то в модели MD примерно то же содержание H_2S наблюдается на мелких пылинках, значительно превосходя содержание на крупных пылинках. Различие содержаний H_2S на крупных пылинках в двух моделях на поздних временах достигает двух порядков величины. Основной вклад в это различие вносит промежуточная область.

Это различие между молекулами C_2O и H_2S вызвано, как минимум, двумя причинами. Во-первых, в принятой сетке поверхностных химических реакций C_2O является промежуточным компонентом на пути к синтезу C_3O , тогда как H_2S является конечным продуктом поверхностной химии серы. Во-вторых, химия серы существенно проще химии углерода и сильнее зависит от поверхностных реакций. Поэтому содержание молекулы C_2O , в которой связана незначительная доля атомов углерода, зависит от многих деталей газофазной и поверхностной химии, тогда как содержание H_2S в промежуточной области (рис. 3.3 в и г), по сути, совпадает с содержанием серы ($\sim 10^{-8}$).

Реакции, доминирующие в газофазных процессах разрушения и образования молекулы H_2S , в разных моделях частично различаются. В частности, в моделях D и MD различны скорости реакций разрушения. В модели D доминируют прежде всего реакции с ионами, особенно H_3^+ , H^+ и HSO^+ . Вклад процессов вымерзания значителен, но не превосходит по скорости реакции с ионами. Иначе обстоит дело в модели MD, в которой весьма эффективна аккреция на пылинки второго населения (из-за их большой суммарной площади). Ее скорость в два-три раза превосходит скорость реакций с H_3^+ . Скорость десорбции с пылинок второго населения не превышает скорость десорбции в модели D, что в модели MD приводит к уменьшению

содержания H_2S в газовой фазе и к накоплению значительного количества молекул на пылинках второго населения. Молекулы также синтезируются и на самих пылинках в реакции $s\text{-HS}$ с атомами аккрецированного водорода (здесь и далее в данной главе литерой “s-” обозначаются пылевые компоненты). В газовой фазе ведущую роль в образовании молекулы в обоих случаях играют реакции диссоциативной рекомбинации ионов H_2S^+ и H_3S^+ . Примечательно, что в модели MD они происходят преимущественно с пылинками второго населения. Более высокое содержание H_2S в близких к источнику излучения областях и на внешней границе облака в модели MD объясняется, как и в случае C_2O , эффективным экранированием ультрафиолетовых фотонов пылинками второго населения.

В следующей рассматриваемой группе молекул одной из самых репрезентативных является молекула N_2O . Молекул N_2O в модели MD становится меньше как в газе, так и на пылинках. Содержание в газовой фазе в первую тысячу лет почти не меняется, а затем возрастает, но не настолько, чтобы достичь уровня модели D, в которой содержание N_2O растет на протяжении всего рассматриваемого периода (рис. 3.4 д и е). Причина низкого содержания N_2O (и других азотсодержащих соединений) в модели MD кроется в более эффективном вымерзании на пылинках второго населения молекулы OCN , реакция которой с оксидом азота является одним из основных источников N_2O . Это объяснение справедливо для большей части облака, за исключением граничных регионов, где в модели D реакции разрушения под воздействием ультрафиолетовых фотонов проходят более интенсивно, чем в модели MD. В освещенных областях облака содержание N_2O оказывается более высоким в модели MD, но эти области не вносят существенного вклада в лучевую концентрацию (рис. 3.3 д и е).

Для оценки вклада параметров увеличения площади и повышенной температуры пылинок второго населения, мы провели дополнительное исследование, рассчитав модель LS, в которой пылинки второго поколения

присутствуют, однако коэффициент прилипания для них сведен к нулю. Это означает, что пылинки второго населения в модели LS участвуют в химической эволюции только в качестве дополнительного компонента среды: в реакциях диссоциативной рекомбинации и поглощении ультрафиолетовых фотонов. Этого оказалось достаточно, чтобы обусловить некоторые особенности химической эволюции по сравнению с моделью MD. По отклику на “пассивное” присутствие пылинок второго населения компоненты разделились на несколько групп.

К первой группе относятся компоненты, для эволюции которых запрет аккреции на пылинки второго населения оказался эквивалентен отсутствию этих пылинок (то есть, нет существенной разницы между моделями D и LS). К этой группе относятся такие газофазные компоненты, как HC_3N , NO_2 и другие, и значительная доля пылевых компонентов, например, $s\text{-CO}_2$, $s\text{-HC}_3\text{N}$, $s\text{-NO}_2$ (рис. 3.5 а и б). Это, очевидно, компоненты, для которых присутствие второго населения пыли важно в первую очередь с точки зрения дополнительной поверхности. Однако ситуация не всегда бывает столь однозначной. Например, лучевая концентрация HC_3N в моделях D и LS примерно одна и та же, однако радиальные профили отличаются в том смысле, что в освещенных частях облака содержание HC_3N в модели LS повышено, как в модели MD, из-за поглощения УФ-излучения мелкими пылинками, а в темной промежуточной области оно меньше, чем в модели D, из-за более эффективного вымораживания на крупных пылинках (рис. 3.6 а и б).

Ко второй группе относятся компоненты, для которых запрет аккреции не привел к существенным отклонениям от модели MD. Это большая часть ионов (H^+ , CS^+ , CH_3^+ , Fe^+ и др., рис. 3.5 в), для которых мелкие пылинки важны, в первую очередь, как носители заряда, некоторые поверхностные компоненты ($s\text{-CH}_3\text{CCH}$, $s\text{-CH}_3\text{CH}_3$, $s\text{-C}_2\text{H}_4$), а также незначительное число нейтральных газофазных молекул (C_7 , C_2O). В основном,

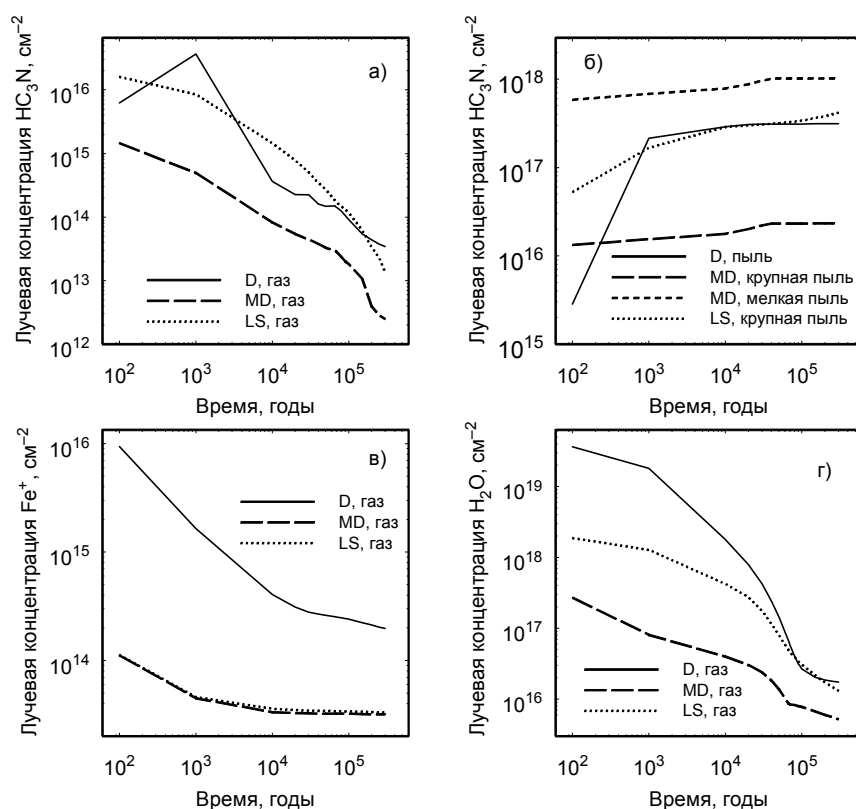


Рис. 3.5. Эволюция лучевых концентраций компонентов в стандартных моделях и в модели LS с запретом аккреции на мелкие пылинки.

ко второй группе относятся все компоненты, содержание которых прямо или косвенно зависит от участия в процессах обмена зарядами с пылинками.

В третью группу входят компоненты, эволюция которых в модели LS отличается от эволюции как в модели D, так и в модели MD. Среди этих компонентов следует особо отметить воду. Современные астрохимические модели зачастую предсказывают ее содержание, существенно превышающее наблюдательные оценки как для протозвездных объектов, так и для протопланетных дисков ([88], Глава 1). На рис. 3.5 г видно, что включение в модель мелких пылинок на ранних этапах эволюции облака позволяет снизить газофазную лучевую концентрацию воды на два порядка (модель MD). Это связано с тем, что вода может образовываться как в газовой фазе, так и на поверхностях пылинок. При этом энергия десорбции молекулы воды достаточно велика (принятое нами значение $T_D = 4820 \text{ K}$), поэтому

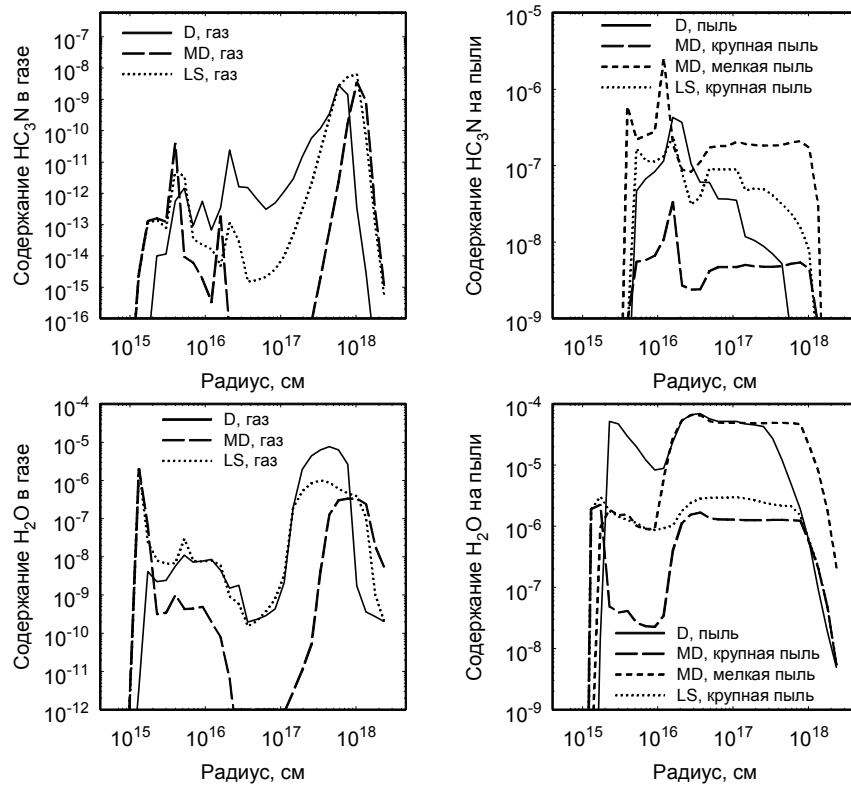
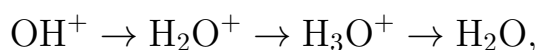


Рис. 3.6. Радиальные профили содержания HC_3N в газе и на пыли на момент времени 10^5 лет (верхние рисунки) и содержания воды в газе и на пыли на момент времени 10^4 лет (нижние рисунки). Показаны стандартные модели, а также модель LS с запретом аккреции на мелкие пылинки.

как при ее вымерзании из газовой фазы, так и при образовании непосредственно на пыли большая часть молекул воды остается в составе ледяных мантий. Неудивительно поэтому, что в модели MD увеличение доступной поверхности пылинок приводит к более эффективному “уводу” атомов кислорода, в том числе, в составе молекул H_2O , из газовой фазы.

Однако, с другой стороны, более эффективное поглощение УФ-излучения на временах порядка 10^4 лет приводит к повышенному газофазному содержанию воды в освещенных частях облака, главным образом, в его внешней части (рис. 3.6 в). В модели MD это повышение не может компенсировать падение содержания в промежуточной области, но в модели LS вклад периферийных областей оказывается более существенным. Кроме того, в модели LS имеется протяженный диапазон расстояний, примерно от 10^{17} до 10^{18} см, в котором содержание воды оказывается ниже, чем в модели D. Эта разница, очевидно, связана с еще одним отличием между моделями с одним и двумя населенными пылью — плотностью зарядов, доступных для реакций диссоциативной рекомбинации. В модели LS она такая же, как в модели MD, то есть, на порядок выше, чем в модели D (за счет наличия мелких пылинок). В результате в цепочке газофазных реакций



ведущей к образованию воды, более эффективными оказываются промежуточные этапы, в конечном итоге, возвращающие в газовую фазу свободные атомы кислорода.

Наконец, в еще одной дополнительной модели температура была принята одинаковой для пылинок первого и второго населения, тем самым реакции на поверхностях пылинок второго населения стали менее эффективными. Отличие от стандартной модели MD оказалось незначительным, поскольку регион, в котором температуры населений пыли отличаются, весьма локализован. В этом регионе более высокая температура мелких

пылинок увеличивает содержание ряда компонентов в несколько раз, однако на лучевой концентрации это не сказывается.

3.4. Обсуждение и выводы

Пыль является одним из основных участников астрохимических процессов, и потому естественно предположить, что чрезмерно упрощенный подход к описанию ее свойств может привести к недостоверным результатам. В данной работе поставлена цель исследовать отклик молекулярного состава протозвездного объекта на наличие двух принципиально различных компонентов пыли — классических крупных пылинок и мелких частиц, по размеру отличающихся примерно на два порядка.

Представленные результаты показывают, что включение второго населения пыли в модель действительно оказывает значительное влияние на химическую эволюцию, в том числе, и в отношении наблюдаемых молекул. Однако влияние перечисленных выше факторов неравнозначно, как продемонстрировало, например, исследование с нулевым коэффициентом прилипания для мелких пылинок. Анализ скоростей реакций позволяет выявить закономерности, определяющие, какой именно вклад вносят мелкие пылинки в эволюцию содержания различных компонентов.

В рассмотренных физических условиях существенным фактором оказалось, как и следовало ожидать, увеличение площади пылинок, доступной для вымораживания и поверхностных реакций, однако оно в нашем расчете сказалось, главным образом, на перераспределении компонентов между пылинками различных размеров. В эволюции газофазных содержаний важную роль играют экранирование УФ-излучения и реакции диссоциативной рекомбинации. Вклад увеличенной площади поверхности в газофазную химию невелик, что продемонстрировала модель LS — после того как эффективная площадь мелких пылинок была исключена из рассмотрения, результат расчета для значительного числа компонентов оказался

примерно таким же, как в модели D. В тех случаях, когда между моделями D и LS есть различия, они связаны с компонентами, для которых определяющими являются реакции при столкновениях с мелкими пылинками или диссоциация УФ-излучением. Компоненты же, эволюция которых в модели LS отлична и от модели D, и от модели MD, оказались под влиянием противоположных тенденций для компонентов, с которыми они связаны цепочками химических превращений.

Эффект различия в температурах пылинок оказался незначительным, однако следует помнить, что в нашей постановке это различие охватывает незначительную часть облака. В других обстоятельствах — например, в объекте с более иррегулярной структурой — оно может оказаться более значимым. Учет сложного распределения вещества может привести к тому, что область, прогреваемая внутренним источником, окажется более обширной.

Несомненно значительным оказалось увеличение концентрации пылинок. Как уже сказано выше, в областях, граничащих с источниками УФ-излучения, наибольший вклад в различие содержаний вносит эффективное экранирование излучения мелкими пылинками. Поэтому в регионах, ближайших к звезде и к внешней границе облака, содержание сложных молекул в модели MD увеличивается по сравнению с моделью D, что в большинстве случаев заметно сказывается на лучевых концентрациях. Также мелкие пылинки гораздо чаще, чем крупные, сталкиваются с газофазными компонентами, участвуя в обмене зарядами, часто сопровождающемся диссоциативной рекомбинацией, или адсорбируя компонент.

Таким образом, можно сделать вывод, что в разных обстоятельствах (не все из которых охвачены в диссертационной работе) важными могут оказаться как параметры индивидуальных пылинок (размер, температура), так и их количество. Если индивидуальные особенности пылинок и экранирование ультрафиолета можно как-либо параметризовать, то столк-

новительные реакции иначе как введением дополнительного пылевого компонента смоделировать невозможно. Учитывая необходимость сохранить массовую долю пыли относительно газа, увеличение концентрации пылинок в любом случае будет состоять во включении в расчет мелких частиц.

Отдельными темами для дальнейших исследований могут стать поверхностные процессы и десорбция с учетом стохастического нагрева мелких пылинок. Скачкообразное увеличение температуры пылинки может приводить к ускорению как поверхностных реакций, так и десорбции. В результате пылинка может периодически “впрыскивать” в газовую фазу определенное количество синтезированных на поверхности молекул, частично накопленных во время “холодного” интервала между двумя событиями нагрева.

В целом, можно прийти к выводу, что пылинки различных размеров по-разному влияют на химические процессы в дозвездных и протозвездных объектах, причем в разных обстоятельствах на первый план могут выходить различные аспекты этого влияния. В связи с этим различные параметризации распределения пылинок по размерам являются лишь частичным решением проблемы. Для создания универсальной модели предпочтительно явным образом вводить в рассмотрение пылинки различных размеров.

3.5. Положения, выносимые на защиту

По результатам третьей главы на защиту выносятся следующие положения:

Исследована роль пылинок, различающихся размерами, массовой долей и температурой, в химической эволюции протозвездных объектов. Показано, что введение мелких пылинок (с сохранением полной плотности пыли в среде) оказывается некритичным примерно для трети компонентов.

В областях, граничащих с источниками УФ-излучения, наибольший вклад в различие содержаний вносит эффективное экранирование излучения мелкими пылинками.

4. Возможности диагностики элементного состава протозвездных объектов

Как уже упоминалось в Главах 2 и 3, важнейшим для корректного расчета химической эволюции является правильный учет участвующих реакций, а также химического состава облака. Для определения степени важности изначального химического состава, а также влияния усложненной химической сетки реакций, было проведено данное исследование. Здесь использовалась расширенная сетка химических реакций, включающая в себя химию дейтерированных соединений. Исследована чувствительность ряда особенностей химической эволюции молекулярного облака к элементному химическому составу. Рассмотрено четыре модели — модель с высокой металличностью, эволюция которой протекает исключительно в газовой фазе, две модели с низкой металличностью, процессы в которых протекают как в газовой фазе, так и на поверхности пылинок, а также модель с низкой металличностью и искусственно заниженным содержанием кислорода. По результатам главы опубликована статья Кочина, О.В., Вибе, Д.З. Метод диагностики элементного состава протозвездных объектов // *Астрономический журнал*. — 2017. — Т. 94, № 2 — С. 114 – 126.

4.1. Элементный состав областей звездообразования

Основными слагаемыми модели химической эволюции протозвездных объектов являются физическое представление объекта (распределение плотности, температуры, поля излучения и пр.), начальный химический состав и совокупность химических реакций. Как было ранее показано нами в предшествующих главах, с точки зрения чувствительности лучевых

концентраций различных химических компонентов и (или) интенсивностей соответствующих спектральных линий более важным фактором оказываются не вариации физической структуры, а детали химической модели. В частности, на результаты расчетов химической эволюции значительно повлиял учет наличия нескольких населений пылинок с различными свойствами, тогда как к изменениям плотности в протозвездном облаке и параметрам центральной протозвезды результаты расчетов лучевых концентраций и интенсивностей линий сложных молекул оказались практически нечувствительны (в рассмотренном диапазоне параметров).

Вывод о том, что именно особенности химической модели оказывают наиболее значительное влияние на результат, приводит к необходимости рассматривать другие потенциально важные параметры. В этой главе мы исследуем, насколько важен корректный выбор данных о начальном и элементном химическом составе облака и можно ли определить этот состав по наблюдениям молекулярных линий. Элементным химическим составом мы называем полное содержание атомов конкретных химических элементов в среде (как в свободном состоянии, так и в составе молекул). Под начальным химическим составом понимается распределение этих атомов по различным химическим компонентам в момент времени $t = 0$.

Непосредственно определить содержание компонентов относительно молекулярного водорода сложно, поэтому при сопоставлении результатов теоретического моделирования с результатами наблюдений сравнивают относительные содержания различных компонентов. Однако содержание компонента зависит не только от эволюционной стадии и условий в облаке, но и от количественного соотношения атомов, входящих в состав компонента. Элементный состав среды определяет путь химической эволюции, способствует синтезу тех или иных компонентов, а это в свою очередь активизирует ветви реакций для других компонентов, связанных с первичными уже косвенно. Такую же роль играет и начальный химический состав,

например, нейтральное или ионизованное состояние определенных атомов, атомарное или молекулярное начальное состояние водорода и пр.

Вопрос о роли начального и элементного состава рассматривался в литературе неоднократно, в частности, в контексте так называемой бистабильности [89], а именно существования в газофазных химических моделях двух равновесных состояний — с высокой и низкой степенью ионизации. В работе [90] было показано, что режим появления бистабильности в газофазных химических моделях зависит как от степени обеденности газовой фазы атомами тяжелых элементов (например, серы), так и от соотношения содержаний кислорода и углерода. Влияние отношения содержаний С/О на явление бистабильности обсуждалось также в работе [91]. Авторы работы [92] показали, что возможность появления бистабильности существенно зависит от содержания в среде атомов металлов, в частности, натрия, магния и железа, а также от содержания серы. Однако, как показано в работах [93–95], бистабильность в большей степени присуща газофазным моделям, тогда как в моделях с учетом поверхностных реакций она либо подавлена, либо смещается в область нереалистично малых плотностей.

Другая группа работ, в которых исследуется влияние начального и (или) элементного состава на химическую эволюцию различных объектов межзвездной среды, связана с исследованием систем, металличность которых существенно уступает металличности в солнечной окрестности. Интерес к этим исследованиям связан, главным образом, с наблюдениями внегалактических областей звездообразования в галактиках низкой металличности, а также с наблюдениями галактик на больших красных смещениях. В качестве примера можно привести работу [96], в которой рассматриваются особенности молекулярного состава диффузных и плотных облаков на разных этапах химической эволюции Галактики, характеризующихся различными элементными составами. Авторами было, в частности, показано, что низкое содержание кислорода в малометаллической среде приводит к его

более эффективной трансформации в молекулу O_2 и к меньшему содержанию ряда оксидов.

Исследование особенностей молекулярного состава вещества в широком диапазоне металличностей (вплоть до $10^{-3} Z_{\odot}$) было проведено авторами [97]. Особое внимание уделялось синтезу молекулярного водорода, оксида углерода и гидроксидов.

Оригинальное исследование чувствительности результатов химического моделирования было представлено в работе [98]. Ее авторы случайным образом варьировали различные параметры химической модели, в том числе, начальный и элементный составы. Было показано, что вычисленные содержания углеродсодержащих молекул зависят от соотношения C^+ и CO в начальном химическом составе, а также от соотношения содержаний C и O в элементном составе. В частности, изменение отношения C/O от 0.1 до 1 приводит к различию в расчетном содержании HC_3N на момент времени 10^7 лет в несколько порядков величины.

Отличительной чертой подобных работ является рассмотрение очень широкого диапазона металличностей, как правило, в однозонном приближении, то есть в объеме пространства с фиксированными физическими параметрами. Процессы на поверхностях пылинок либо не моделируются совсем, либо моделируются в очень ограниченном варианте.

В данной главе мы рассматриваем возможность диагностики элементного и начального химического состава протозвездных объектов, используя расширенную сетку химических реакций из работы [99], включающую в себя подробное описание эволюции дейтерированных (в том числе, сложных) соединений. При этом мы, как и в предыдущих главах, строим эволюционную модель не для одной точки пространства, а для радиального среза, проходящего от периферии объекта к его центру. Это позволяет нам учитывать вариации температуры, плотности и поля излучения вдоль среза, а также моделировать интенсивности спектральных линий. Ставится за-

дача выявить компоненты, которые могут быть хорошими индикаторами начального и элементного состава, а также найти компоненты, по относительным интенсивностям молекулярных линий которых можно определять элементный состав, наиболее соответствующий параметрам данной области. Детально исследована эволюция ряда компонентов, представляющих особый интерес для астрохимии и астробиологии. Рассмотрена также чувствительность к начальным условиям эволюции содержания молекулы HF, которая в последнее время привлекает к себе внимание тем, что ее можно использовать в качестве индикатора содержания H_2 в молекулярных облаках.

4.2. Модель протозвездного объекта

В исследовании, как и в предыдущих главах, использована многоточечная модель химической эволюции дозвездных и протозвездных объектов “Presta”, описанную в Главе 1. Скорости реакций рассчитываются на основе базы реакций Альбертссона и др. [99]. С учетом поверхностных реакций модель включает в себя 1879 компонентов и 47814 реакций. В рассматриваемой поверхностной сетке реакций предполагается мгновенная десорбция части продуктов. Результаты расчета химической 1D-структуры объекта позволяют рассчитать лучевые концентрации молекул.

Физическая модель региона, использованная в исследовании, представлена на рис. 4.1. Радиальный профиль температуры строится для облака, которое освещается внешним средним галактическим полем излучения и внутренним источником (протозвездой) с температурой 5000 К. В Главе 2 мы показали, что эволюция физической структуры незначительно влияет на лучевые концентрации и интенсивности линий, потому в данной главе распределения плотности и температуры считаются неизменными на протяжении всего исследуемого периода.

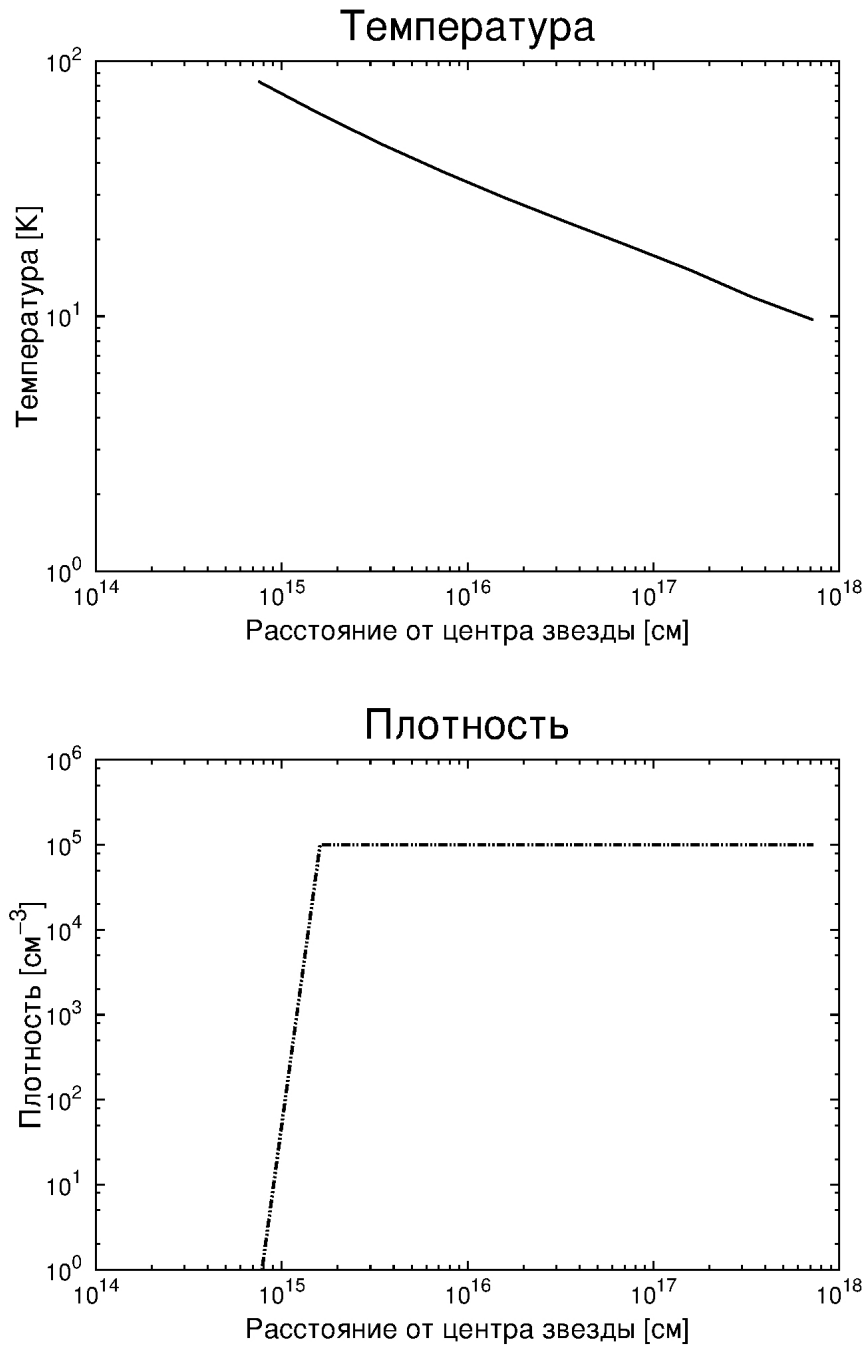


Рис. 4.1. Распределение температуры и плотности в рассматриваемом модельном протозвездном объекте.

4.2.1. Начальный химический состав

В начальном химическом составе играют роль два аспекта. Во-первых, важно полное содержание атомов различных элементов. Здесь различают модели с высокой металличностью, в которых содержание тяжелых элементов практически не отличается от солнечного, и модели с низкой металличностью, в которых содержание тяжелых элементов понижено из-за их связывания в пылинках и (или) из-за общей низкой металличности (как например в карликовых иррегулярных галактиках). Еще одним важным параметром, во многом определяющим химическую эволюцию, является отношение полного содержания атомов углерода и кислорода, которое может быть разным в различных объектах. Во-вторых, в начальном химическом составе некоторые атомы могут присутствовать как в нейтральном, так и в ионизованном состоянии. Также часть атомов может считаться изначально связанной в молекулах.

Для выявления роли начального химического состава и возможности по наблюдениям определить, какой именно химический состав следует использовать при моделировании конкретного региона, нами были рассчитаны четыре модели. Химический состав первой модели, Presta, соответствует составу, использовавшемуся нами в предыдущих главах, в том числе при успешном воспроизведении наблюдательных содержаний сложных молекул в областях образования как звезд малой массы (TMC-1C), так и массивных звезд (DR21(OH)) (Глава 1). Для расчета химии дейтерированных соединений начальное содержание дейтерия в модели принято равным 1.5×10^{-5} . Газофазное содержание металлов в модели Presta невысоко, так как считается, что основная часть их атомов связана в пылинках и не участвует в химической эволюции. Модель является вариантом элементного состава с низкой металличностью.

Вторая модель, LM (low metallicity), рассчитана с использованием химического состава из работы [100], посвященной моделированию химиче-

ской эволюции протопланетных дисков. Содержание металлов в этой версии элементного состава также понижено. Содержание фтора, который в статье [100] не рассматривался, взято из элементного состава Presta.

Третья модель, НМ (high metallicity), представляет собой элементный состав Солнечной системы, выведенный из наблюдений Солнца и исследования метеоритов [101, 102]. В этом элементном составе не учитывается разделение на газофазную среду и твердые пылинки, потому при расчете модели НМ мы не учитывали присутствие в облаке пылинок и считали химию полностью газофазной. В том числе исключена и поверхностная реакция образования молекулярного водорода, поэтому водород в данной модели изначально считается полностью молекулярным. Содержание дейтерия взято таким же, как в моделях Presta и LM. Поскольку водород считается изначально молекулярным, весь дейтерий тоже изначально считается связанным в молекулы HD.

Существенным фактором химической эволюции может быть не только общее содержание тяжелых элементов, но и их относительное содержание, в частности, отношение количества атомов углерода и кислорода. Если отношение содержания углерода к содержанию кислорода меньше единицы, почти весь углерод связан в CO, а избыток кислорода связывается в молекулы воды, и содержание CO₂ невелико. В случае же, когда преобладает содержание углерода, в CO уходит почти весь кислород, за счет этого воды заметно меньше, а содержание CO₂ высоко. Также в случае преобладания углерода открываются дополнительные пути синтеза сложной органики, особенно компонентов, включающих в себя атомы азота. В первых трех моделях кислород доминирует, в четвертой модели, LowO, мы искусственно понизили его содержание до 7×10^{-5} , чтобы рассмотреть возможные последствия доминирования углеродной химии.

Все начальные содержания перечислены в табл. 4.1. Следует отметить ряд отличий, который несомненно отразится на итоговых содержа-

[ht]

Таблица 4.1. Наборы начальных газофазных содержаний* компонентов** относительно водорода, используемые в моделях

Компонент	Presta	LM	HM	LowO
H	1.00	1.00	—	1.00
H ₂	—	—	5.00(−1)	—
D	1.50(−5)	1.50(−5)	—	1.50(−5)
HD	—	—	3.00(−5)	—
He	1.40(−1)	9.75(−2)	9.75(−2)	1.40(−1)
C	7.30(−5)	7.86(−5)	3.62(−4)	7.30(−5)
O	1.76(−4)	1.80(−4)	8.53(−4)	7.00(−5)
N	2.14(−5)	2.47(−5)	1.21(−4)	2.14(−5)
F	2.00(−8)	2.00(−8)	3.02(−8)	2.00(−8)
Si	(⁺) 3.00(−9)	9.74(−9)	3.58(−5)	(⁺) 3.00(−9)
S	(⁺) 2.00(−8)	9.14(−8)	1.85(−5)	(⁺) 2.00(−8)
Cl	(⁺) 3.00(−9)	1.00(−9)	1.87(−7)	(⁺) 3.00(−9)
Na	(⁺) 3.00(−9)	2.25(−7)	2.06(−6)	(⁺) 3.00(−9)
Mg	(⁺) 3.00(−9)	1.09(−6)	3.85(−5)	(⁺) 3.00(−9)
Fe	(⁺) 3.00(−9)	2.74(−7)	3.22(−5)	(⁺) 3.00(−9)
P	(⁺) 3.00(−9)	2.16(−10)	3.73(−7)	(⁺) 3.00(−9)

* Запись в виде $a(b)$ означает, что содержание равно $a \times 10^b$.** Обозначение (⁺) перед содержанием компонента означает, что элемент считается изначально ионизованным.

ниях соединений, включенных в модель. Во-первых, в модели с высокой металличностью содержания углерода, кислорода и азота (основных после водорода участников химической эволюции) почти в пять раз превосходят содержания этих элементов в моделях с низкой металличностью. Содержание фтора в модели с высокой металличностью также превосходит его содержание в модели с низкой металличностью в полтора раза.

Содержания C, N и O в моделях LM и Presta отличаются друг от друга незначительно. Элементы с обедненным содержанием отличаются друг от друга значительно. Так, содержания кремния, серы и магния в моде-

ли LM превосходят содержания в модели Presta в 3–4 раза. Содержания хлора и фосфора, напротив, больше в модели Presta. Содержания железа и натрия практически совпадают. Принципиальным различием начальных составов в моделях Presta и LM состоит в том, что в модели Presta тяжелые элементы вступают в эволюцию в ионизованном виде, в то время как в модели LM начальный состав включает в себя исключительно нейтральные компоненты.

Количественные различия в моделях с низкой металличностью малы по сравнению с на порядки превосходящими содержаниями в модели НМ, где не учитывается связанность тяжелых редких элементов в пылинки. Различия имеют наименьшее значение в два порядка для хлора и достигают четырех порядков для железа, магния и кремния. Среднее отличие составляет три порядка. При сравнении содержаний газофазных соединений также следует помнить, что в модели с высокой металличностью не рассматривается возможность оседания на пылинки, таким образом изначальная разница содержаний в процессе эволюции может быть сглажена или усугублена.

4.3. Результаты

Результаты моделирования ряда важных для астрохимии компонентов представлены на рис. 4.2. Бросается в глаза слияние графиков эволюций содержаний молекул CO и CO₂ в обеих низкометаллических моделях (Presta и LM). На протяжении всей эволюции они идут практически идентично. Только для CO₂ на поздних временах в модели LM наблюдается избыток по отношению к модели Presta, связанный с изменением содержания молекулы на внешней границе облака. В этой области на поздних химических возрастах содержание CO₂ в облаке определяется двумя основными реакциями. Первая из них — реакция фотодиссоциации, приводящая к разрушению молекулы CO₂ с образованием CO и O. Основной же реак-

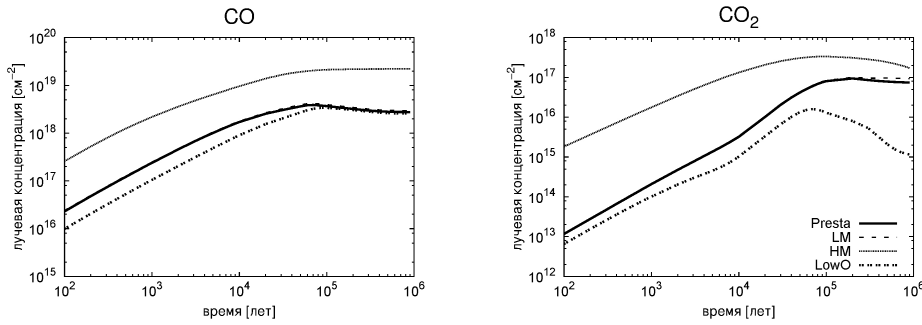


Рис. 4.2. Эволюция лучевых концентраций молекул CO и CO₂ в моделях с различными составами.

цией синтеза оказывается поверхностная реакция обмена



сопровождающаяся химической десорбцией продуктов и, соответственно, повышающая газофазное содержание CO₂.

Интересно, что ключевой в данном случае оказывается именно реакция с молекулой OD, а не с гидроксидом. Это связано с тем, что основной вклад в лучевую концентрацию CO₂ вносят холодные части облака. Поскольку дейтерий изначально считается атомарным, он эффективно примерзает к пылинкам. Его мобильность приводит к эффективному дейтерированию поверхностного кислорода (s-O), из-за чего содержание s-OD становится выше содержания s-OH.

Скорость образования CO₂ в модели LM на всех рассмотренных временах превосходит скорость разрушения. В модели Presta скорости реакций образования и разрушения чаще равны. Иногда скорость разрушения может даже превышать, пусть и незначительно, скорость образования. Различия в содержаниях CO и CO₂ между моделью HM и моделями Presta и LM составляют от одного до двух порядков и сохраняются на протяжении всей эволюции. Они связаны с вымерзанием молекул на пылинках. Поскольку на поздних временах для молекулы CO₂ именно десорбция с

пылинок является основным каналом образования, разница ее содержания в моделях с высокой и низкой металличностью сокращается. В модели LowO содержание молекул CO и CO₂ заметно ниже, что определяется дефицитом атомов кислорода. При этом на поздних временах молекула CO₂ еще более проигрывает конкуренцию за атомы кислорода, и потому ее содержание падает: в процессе диссоциации молекула теряет кислород, что переводит к уменьшению ее содержания и увеличению содержания CO.

Интересны также результаты для более сложных молекул, например, для метанола CH₃OH, ацетонитрила CH₃CN и цианоацетилена HC₃N (рис. 4.3). В первых трех моделях наблюдается постепенное (на протяжении нескольких десятков тысяч лет) увеличение содержания этих молекул в газовой фазе, а затем резкое падение содержания на несколько порядков. В модели LM падение начинается раньше всего, чуть позже происходит падение содержания в модели Presta, за исключением цианоацетилена, содержание которого в моделях LM и Presta падает одновременно. Снижение содержания сложных молекул в модели с высокой металличностью происходит позже, но оказывается самым значительным, особенно для CH₃CN. Ее содержание на поздних временах в моделях с низкой металличностью оказывается выше, чем в модели НМ, хотя на протяжении всей предшествующей эволюции разница в содержаниях между моделями различных металличностей была обратной и достигала пяти порядков. Это различие связано с тем, что на поздних временах образование молекул в моделях с низкой металличностью полностью определяется поверхностной химией, тогда как реакции разрушения, преимущественно фотодиссоциация, одинаковы во всех моделях. В интервале времен порядка 20–30 тыс. лет изменяется баланс в фотореакциях, и они становятся более интенсивными. В результате содержание сложных молекул начинает убывать. В моделях с низкой металличностью убывание частично компенсируется поступлением новых молекул с пыли. В модели НМ, где пылевой химии нет, идут только

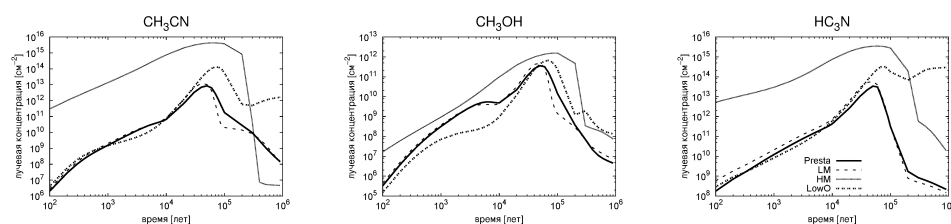


Рис. 4.3. Эволюция лучевых концентраций органических молекул в моделях с различными составами.

медленные газофазные процессы образования. В отсутствие пополнения за счет интенсивных реакций десорбции содержание молекул резко убывает. Изначально в модели с высокой металличностью содержание ацетонитрила и цианоацетилена сильно превосходит их содержание в моделях с низкой металличностью, что связано с повышенным содержанием азота в модели НМ.

На рис. 4.2 и 4.3 также показаны результаты моделирования содержания молекул в модели LowO с пониженным содержанием кислорода. Содержание молекулы CO в этой модели оказывается предсказуемо меньшим, за исключением поздних времен, когда начинают сказываться эффекты вымораживания молекул на пылинках. Еще сильнее недостаток кислорода сказывается на содержании молекулы CO₂. Интересно, что на поздних временах содержание молекул в модели LowO сравнивается с их содержаниями в других моделях несмотря на пониженное содержание кислорода. Вызвано это тем, что изменение баланса содержаний углерода к кислороду привело к качественным изменениям в путях эволюций многих молекул. Атомы С и О перераспределились в модели LowO иначе, чем в моделях со стандартными относительными содержаниями. Так, содержания некоторых компонентов, например, OCN и C₃O стали выше, а содержание CO₂ — ниже.

Избыток атомов углерода становится причиной повышенного содержания органических молекул. Лучевая концентрация метанола в модели LowO превышает лучевую концентрацию этой молекулы в моделях Presta

и LM на порядок величины. Содержание же ацетонитрила и цианоацетилена в модели LowO оказывается очень высоким, превышая содержание этих соединений в моделях Presta и LM на несколько порядков. Повышение содержания азотосодержащих компонентов на поздних временах в целом является интересным эффектом уменьшенного относительного содержания кислорода и может являться предметом отдельного исследования.

4.3.1. Дейтерированные соединения

Одной из основных целей данной главы является исследование влияния металличности и начального элементного состава на эволюцию дейтерированных соединений. Рамки исследования не позволяют сделать полный анализ большого массива компонентов, и потому исследование проводится на примере семи простых основных соединений: DCO, DCO⁺, HD, HD⁺, HDO, O₂D и H₂D⁺. На рис. 4.4 представлены результаты моделирования эволюции содержания этих соединений в различных моделях.

Эволюция дейтерированных соединений оказывается более чувствительной к начальным химическим условиям. Учитывая, что содержания как водорода, так и дейтерия во всех моделях равны, эта чувствительность должна быть связана с содержанием более тяжелых элементов. При этом общий ход химической эволюции обусловлен различиями как в начальном содержании, так и в учитываемых процессах.

Неудивительно, что наименее чувствительной к различию в элементных составах оказалась молекула HD. Различие на поздних временах между моделями с высокой и низкой металличностью вызвано неучетом поверхностных процессов в модели с высокой металличностью, тогда как в моделях с низкой металличностью одним из основных каналов образования этой молекулы оказывается десорбция с пылинок. Замедление роста содержания HD на поздних временах в моделях с низкой металличностью связано с тем, что дейтерий переходит из молекулы HD в изотопологи H₃⁺,

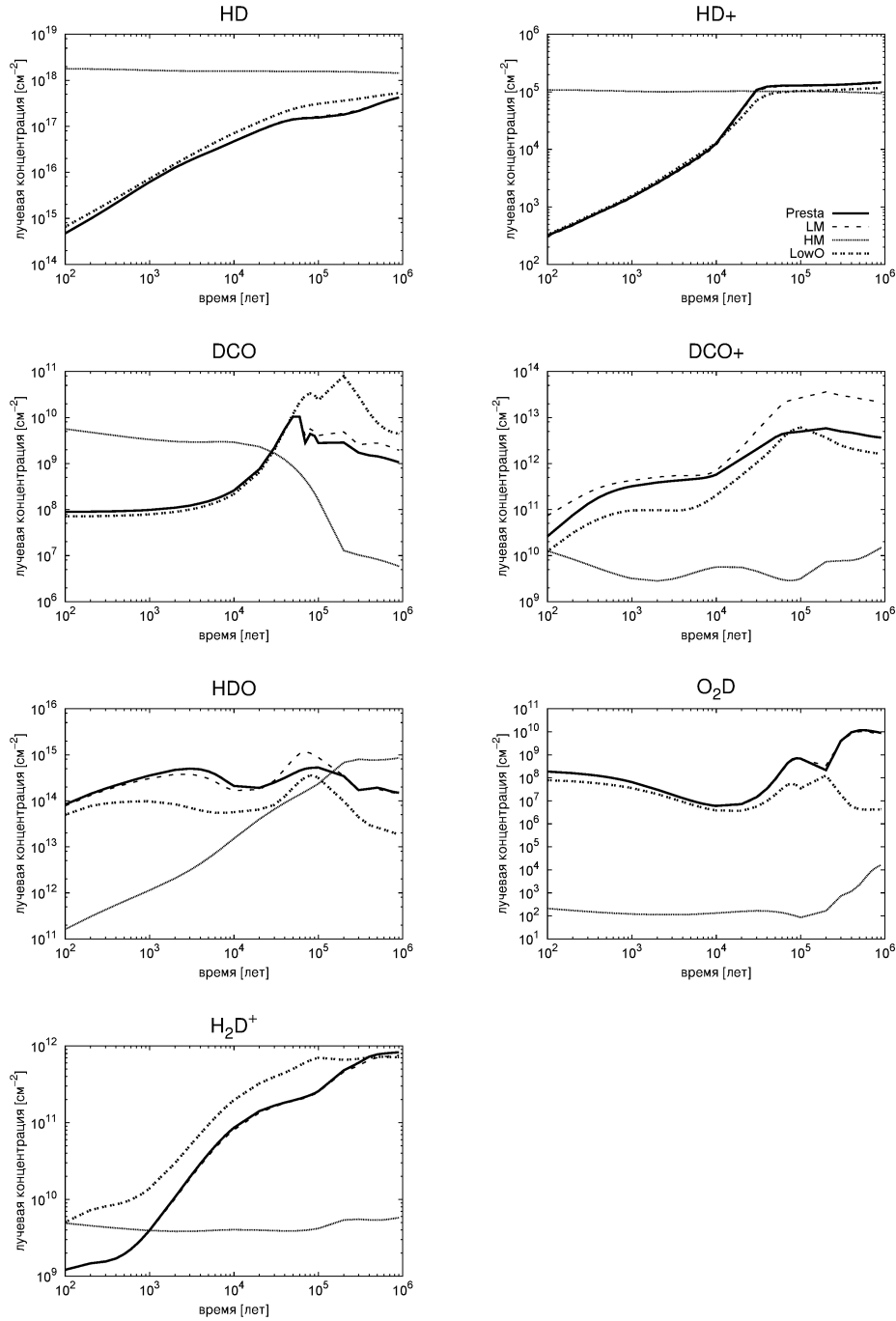
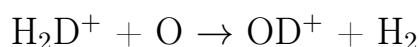
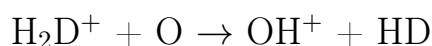


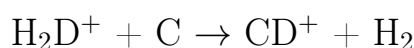
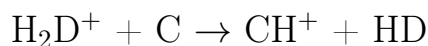
Рис. 4.4. Эволюция лучевых концентраций дейтерированных соединений в моделях с различными составами.

которые рекомбинируют с электронами и образуют атомарный дейтерий. Он, в свою очередь, примерзает к пылинкам, реагирует с поверхностными радикалами и образует многочисленные (в том числе, органические) дейтерированные молекулы. Они остаются на пылинках и более в химии активно не участвуют, что и приводит к замедлению роста содержания HD. Этими же причинами объясняется прекращение роста содержания ионов HD⁺ и H₂D⁺.

Хотя в состав иона H₂D⁺ не входят атомы кислорода и углерода, на его содержание они влияют заметно, участвуя в реакциях разрушения в качестве второго реагента. Содержания H₂D⁺ в моделях низкой металличности, Presta и LM, не отличаются друг от друга за исключением самых поздних времен, но и там отклонения незначительны. Основными реакциями разрушения являются реакции с кислородом:



Вторые по эффективности разрушения — реакции с атомами углерода:

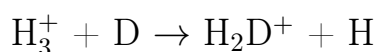


В условиях дефицита кислорода в модели LowO основными реакциями разрушения являются реакции с углеродом, что приводит к повышенному содержанию иона H₂D⁺ в этой модели на большей части расчетного времени. Реакции с атомами кислорода являются вторыми по эффективности на ранних временах, однако впоследствии, когда кислород оказывается в основном связанным в молекулах, эффективность этих реакций снижается и вторыми по интенсивности становятся реакции фотодиссоциации:



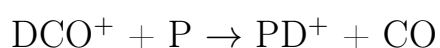
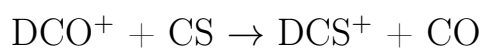
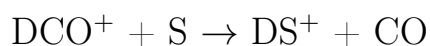
В модели НМ реакции фотодиссоциации гораздо более интенсивны

вследствие полного отсутствия пылинок, способных поглощать ультрафиолетовые фотоны внутреннего источника. В результате реакции разрушения доминируют во внутренних и центральных областях, поддерживая содержание иона на исчезающе низком уровне. Весь вклад в лучевую концентрацию иона вносят внешние области, до которых фотоны от внутреннего источника уже не доходят, а внешнее поле недостаточно сильно, чтобы компенсировать образование и накопление иона в облаке. Основным каналом разрушения иона оказывается на порядок менее эффективным, чем основная реакция образования:



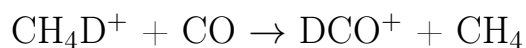
В целом, наши результаты показывают, что чувствительность содержания дейтерированных компонентов к изменению относительного содержания кислорода к углероду заслуживает отдельного рассмотрения.

Различия в лучевой концентрации молекулы DCO в моделях с разными металличностями связаны, как и в случае HD, с учетом или отсутствием учета поверхностной химии, являющейся одним из основных каналов образования этой молекулы. Более интересна причина различий эволюции содержаний иона DCO^+ . Ее эволюция проходит по-разному во всех четырех моделях. Низкое содержание в модели с высокой металличностью определяется присутствием дополнительных каналов реакций разрушения, связанных с повышенным содержанием таких элементов как сера и фосфор. Важными становятся следующие реакции:



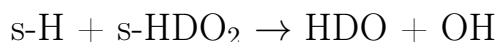
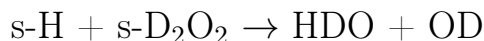
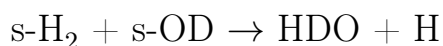
Особенностью эволюции DCO^+ является и различие между моделями с низкой металличностью. В момент времени 10^5 лет лучевые концентрации в моделях LM и Presta отличаются в пять раз. Причина заключается в более быстром росте содержания иона CH_4D^+ в модели LM. Этот ион

участвует в реакции образования иона DCO^+ :

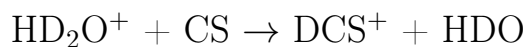
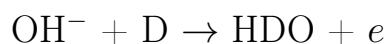
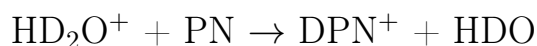
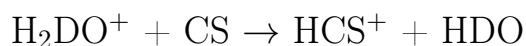
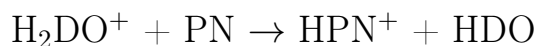


В модели LM реакция идет быстрее, и содержание продуктов реакции возрастает по сравнению с моделью Presta. Возможно также, что низкое обилие DCO^+ в модели НМ отчасти связано с тем, что весь заряд оказывается распределенным по металлам. Ионы металлов медленно рекомбинируют с электронами, и потому обилия молекулярных ионов оказываются ниже, чем в моделях с низкой металличностью.

Эволюция содержания молекулы HDO интересна тем, что в модели с высокой металличностью оно за время эволюции возрастает почти на пять порядков, тогда как в моделях с низкой металличностью содержание HDO остается почти неизменным с колебаниями, не превышающими одного порядка. Связанно это с различиями в основных каналах реакций. В моделях с низкой металличностью содержание HDO определяется поверхностной химией:



В модели с высокой металличностью основную роль играют более “экзотические” реакции:



После 10^5 лет эволюции содержания экзотических соединений в мо-

дели с высокой металличностью становятся выше содержаний поверхностных реагентов, приводящих к образованию молекулы в моделях с низкой металличностью, и лучевая концентрация HDO в модели НМ возрастает.

Последняя из рассмотренных молекул — O_2D , для которой различия в содержании в моделях разной металличности составляют в среднем восемь порядков. Различия также обусловлены различиями в механизмах образования. Молекула эффективно образуется на пыли. В газовой же фазе реакции образования идут крайне медленно. Различия в содержаниях в моделях с низкой металличностью пренебрежимо малы.

Подводя итог по результатам расчетов для дейтерированных соединений, можно сказать, что в целом химия дейтерированных соединений более чувствительна к начальному и элементному составу. В большинстве случаев разница определяется исключительно учетом или неучетом поверхностной химии, но в случае иона DCO^+ заметная разница лучевых концентраций видна даже в моделях с практически идентичным элементным составом, что говорит о возможности использования линий данного иона для тонкой диагностики химических особенностей наблюдаемого региона. Моделированию линий и оценки возможности диагностики будет посвящен раздел 4.4.

4.3.2. Индикаторы молекулярного водорода

В этом подразделе мы отдельно рассматриваем две молекулы, интерес к которым возрос в последнее время, поскольку предполагается, что эти молекулы могут использоваться в качестве альтернативного (по отношению к CO) индикатора наличия молекулярного газа. Одна из этих молекул, содержание которой может быть чувствительно к начальным условиям, — фтороводород (HF) [103]. Химия фтора очень проста: предполагается, что он практически полностью переходит в молекулу фтороводорода, так что окончательное содержание HF в облаке определяется исключительно

общим содержанием атомов фтора. Таким образом, зная содержание фтора относительно водорода, по наблюдениям линий фтороводорода можно установить содержание и молекулярного водорода. Однако здесь возникает две проблемы. Во-первых, содержание фтора невелико, что влечет за собой трудность наблюдения линий. Во-вторых, необходимо определить возраст, когда содержание молекулы HF перестает меняться со временем, поскольку только по достижению этого возраста содержания HF и H_2 связаны между собой линейным соотношением. Также результаты нашего моделирования показывают, что не весь фтор оказывается связанным во фтороводород. Часть атомов остается в несвязанном состоянии вследствие эффективного разрушения молекул HF ультрафиолетовыми фотонами, а часть оказывается в составе других фторосодержащих компонентов, таких как HF^+ , H_2F^+ , CF^+ , SiF^+ , либо вовсе удалена из газовой фазы путем оседания на пылинках.

Эволюция лучевой концентрации фтороводорода в моделях с различными составами показана на рис. 4.5. Сравнение лучевых концентраций HF в моделях с различной металличностью показывает, что момент, когда фтороводород может выступать в роли индикатора содержания молекулярного водорода, различен в разных моделях. В модели с высокой металличностью переход всех атомов F в молекулы HF происходит сравнительно рано, за 20–30 тыс. лет. В моделях с низкой металличностью насыщение происходит в 90 тыс. лет. Таким образом, если возраст облака не превышает времени, за которое содержание HF становится стационарным, фтороводород не может использоваться для определения лучевой концентрации молекулярного водорода. С другой стороны, заметная зависимость содержания HF от начального элементного состава на ранних эволюционных этапах позволяет рассматривать его в качестве индикатора начальных химических условий. Важно отметить, что медленная эволюция HF может быть связана с ограниченной фторной химией в использованной сетке, в которой

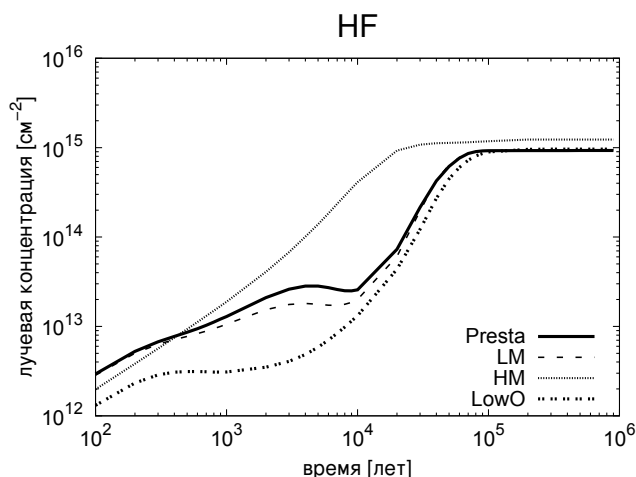


Рис. 4.5. Эволюция лучевой концентрации фтороводорода в моделях с различными составами.

могут отсутствовать некоторые важные быстрые реакции с компонентами, содержащими фтор.

Примечательно, что отношение общего числа атомов фтора к числу атомов водорода в модели с высокой металличностью превышает аналогичное отношение в моделях с низкой металличностью примерно в 1.5 раза, но при этом окончательное отношение лучевых концентраций HF в модели НМ и моделях с низкой металличностью равно примерно 1.3. Это связано с тем, что в модели НМ отсутствуют пылинки, эффективно поглощающие ультрафиолетовые фотоны, и, как следствие, фотореакции разрушения, диссоциирующие молекулу HF на атомы фтора и водорода, идут более продуктивно. Это приводит к некоторому снижению стационарного содержания.

Интересно, что несмотря на равное начальное содержание как фтора, так и водорода, модели с низкой металличностью приходят к насыщению разными путями. Лучевые концентрации в момент времени 5 тыс. лет различаются более чем в полтора раза в моделях Presta и LM и почти в пять раз в в моделях Presta и LowO. Это связано с тем, что в этот период времени содержание молекулы OH, служащей основным реагентом реакции

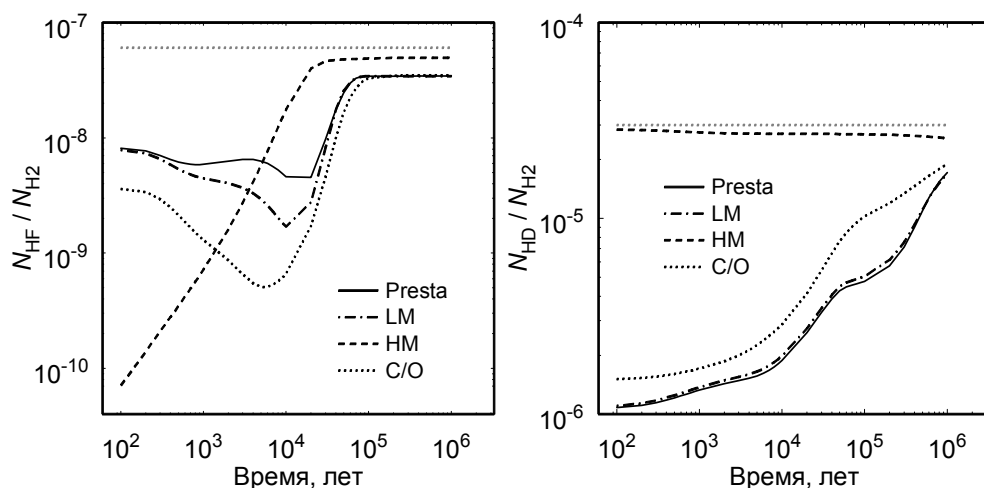


Рис. 4.6. Отношения лучевых концентраций молекул HF и HD к лучевой концентрации молекулярного водорода.

образования HF, в модели Presta оказывается выше, чем в моделях LM и LowO. Таким образом, молекула HF так же, как и ион DCO^+ , оказывается чувствительной к начальному элементному составу, что делает возможным ее использование для диагностики начального элементного состава в регионе.

Вторая молекула, которую также предлагается использовать в качестве индикатора наличия молекулярного водорода, — молекула HD [104]. На рис. 4.6 показаны отношения лучевых концентраций молекул HF и HD к лучевой концентрации молекулярного водорода для различных моделей. Серыми пунктирными линиями показаны отношения, соответствующие ситуации, когда все атомы F и D входят в состав молекул HF и HD, соответственно. Очевидно, что в рамках рассмотренных нами физических условий молекулу HF можно использовать в качестве индикатора молекулярного водорода после 10^5 лет эволюции. Молекула HD даже за миллион лет не достигает до линейного соотношения с молекулой H_2 и, следовательно, отсутствие ее эмиссии не свидетельствует об отсутствии молекулярного газа.

4.4. Моделирование линий

По результатам астрохимического моделирования мы можем выявить компоненты, например HF и DCO⁺, эволюция которых существенно зависит от начального элементного состава. Однако для оценки возможностей реального использования данных компонентов в качестве наблюдательных индикаторов элементного состава необходимо провести моделирование спектральных линий. Мы воспользовались программой для моделирования переноса излучения в приближении не-ЛТР RADEX [74] и рассчитали температуры излучения, прямо пропорциональные интенсивностям линий.

Результаты моделирования для нескольких переходов иона DCO⁺ представлены на рис. 4.7. Мы выбрали временной промежуток от 10⁴ до 10⁶ лет, на котором различия содержаний иона в разных моделях максимальны. Различия в температурах излучения, а значит и интенсивностях, спектральных линий достаточно велики, чтобы быть заметными наблюдателю, даже в рамках моделей с одинаковой металличностью. В частности, интенсивность линий в модели LM, в которой все компоненты изначально нейтральны, оказывается значительно выше, чем в модели Presta. В некоторые моменты температура излучения в модели LM превосходит модель Presta в 5 раз. Линии излучения в модели LowCO, напротив, слабее линий в модели Presta на всем промежутке времени, за исключением периода от 70 до 200 тысяч лет, когда интенсивности линий в двух моделях совпадают, а в 90–100 тысяч лет даже превышают содержание по модели Presta. Различия в модели с высокой металличностью еще более значительны — в случае реализации сценария химической эволюции, не включающего поверхностную химию, линии иона будут ослаблены.

В случае молекулы фтороводорода, моделирование линий привело к неутешительным результатам. Несмотря на заметное различие содержаний, линии излучения HF исчезающе слабы для любой из моделей. Разли-

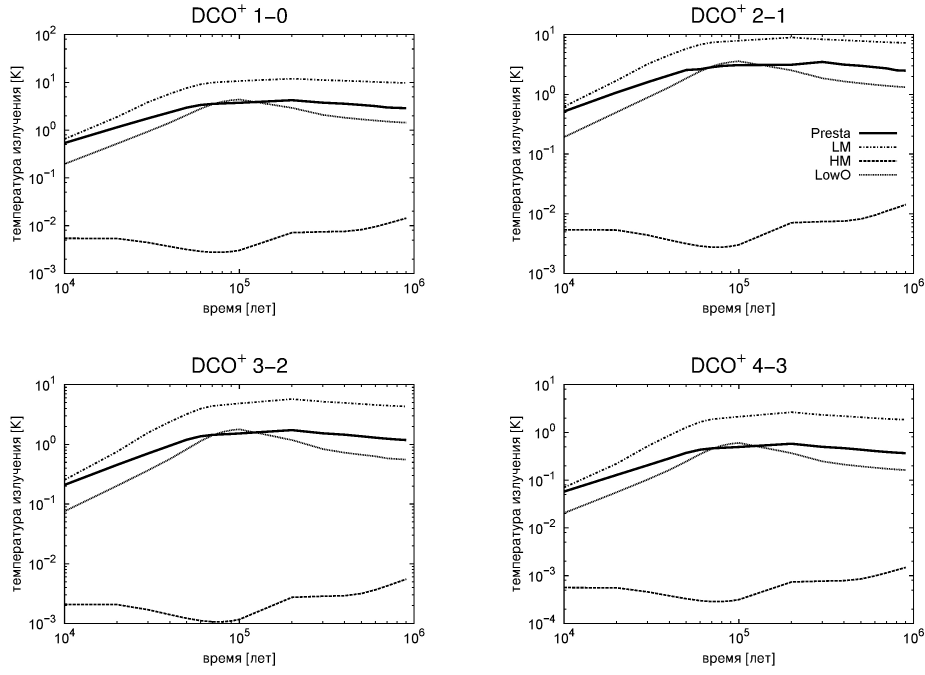


Рис. 4.7. Температуры излучения для нескольких переходов иона DCO⁺ в моделях с различными элементными составами.

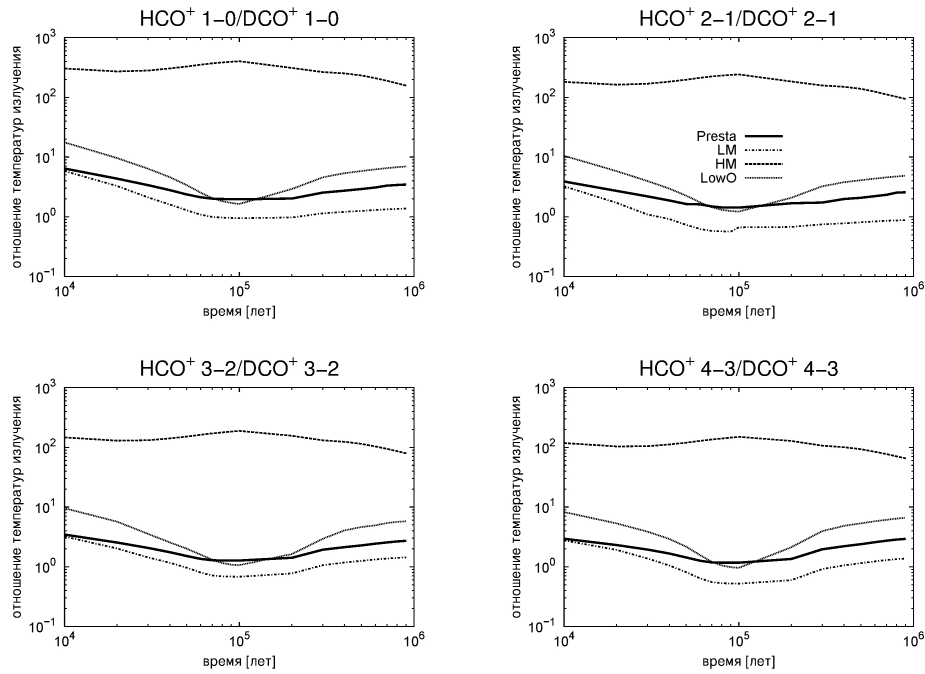


Рис. 4.8. Отношения температур излучения для нескольких переходов иона HCO⁺ к температурам излучения аналогичных переходов иона DCO⁺ в моделях с различными элементными составами.

чия содержаний, способные быть индикаторами начального химического состава, в рассмотренных нами обстоятельствах могут быть заметны только в линиях поглощения этой молекулы. Однако следует помнить, что в других обстоятельствах эмиссионные линии HF могут быть более яркими [105].

4.5. Обсуждение и выводы

По результатам представленного исследования можно сделать вывод, что в рамках рассмотренных моделей начальный химический состав не очень значительно сказывается на ходе химической эволюции большинства компонентов. Большее значение для них имеют именно процессы, идущие или не идущие в облаке, например, поверхностные реакции и связанность значительной части атомов тяжелых химических элементов в пылинки. Однако присутствуют и компоненты, на эволюцию которых влияет даже незначительное изменение в начальном химическом составе. Одним из таких компонентов, подробно рассмотренных в нашем исследовании, является ион DCO^+ . Эволюция иона проявила чувствительность к начальной степени ионизации атомов тяжелых химических элементов даже при условии идентичного набора протекающих реакций и схожего элементного состава. Выявление подобных чувствительных компонентов и наблюдение спектральных линий поможет лучше определять начальный химический состав и точнее воспроизводить наблюдаемый состав путем численного моделирования.

Рассмотренные нами вариации начального химического состава соответствуют межзвездной среде нашей Галактики на солнечном радиусе. В последнее время началось накопление наблюдательного материала о содержании различных молекул в других галактиках, в том числе, систем, металличность которых существенно отличается от солнечной. В этом отношении представляют интерес исследования химической эволюции при

существенно больших вариациях состава, как в целом для содержания тяжелых элементов, так и для вариаций содержания отдельных элементов.

4.6. Положения, выносимые на защиту

По результатам четвертой главы на защиту выносится следующее положение:

Продemonстрирована возможность диагностики элементного состава протозвездных объектов по наблюдениям сложных органических и/или дейтерированных молекул. Показано, что наибольшей чувствительностью к элементному составу обладает ион DCO^+ .

Заключение

Соискателем проведено комплексное исследование возможностей определения параметров областей звездообразования путем химического моделирования. Проведено моделирование и определены химические возрасты значительно различающихся между собой областей звездообразования TMC-1 и DR(21)ОН. Определены границы возможностей химического моделирования по определению эволюции физических параметров и текущего состояния протозвездных объектов. Выявлено, что усложнение моделей не вносит существенного вклада в количественное изменение химического состава плотной оболочки вокруг протозвезды. Определены компоненты, способные служить индикаторами процессов, происходящих в облаке. Исследован вклад мелких пылинок в химическую эволюцию области звездообразования. Показано, что различные группы компонентов по-разному реагируют на присутствие пыли мелких пылинок. Исследована чувствительность ряда особенностей химической эволюции молекулярного облака к элементному химическому составу. Показано, что начальный состав так или иначе сказывается на химической эволюции большинства компонентов, но иногда его влияние незначительно. Большее значение имеет включение тех или иных химических факторов, например, поверхностных реакций и деплиции значительной части атомов тяжелых химических элементов в пылинках. Выявлен компонент, способный служить индикатором начальной степени ионизации атомов тяжелых элементов. Рассмотрена возможность использования молекул HD и HF в качестве индикаторов наличия молекулярного водорода. Итогом работы также является разработка программного инструмента, пригодного как к качественной диагностике условий в областях образования, так и к предоставлению теоретиче-

ских рекомендаций исследователям и наблюдателям, выявляя компоненты-индикаторы и определяя границы возможностей методики.

В дальнейшем соискателем планируется применить отработанную методику для определения физических условий в малоисследованных областях звездообразования, а также расширить данную методику для возможности работать с иными объектами, в том числе, учитывая распределение зарядов различной величины по пылинкам разных размеров.

Благодарности

Автор выражает благодарность своим коллегам и соавторам Д. Вибе, Я. Павлюченкову, В.Акимкину, Д.Семенову, А. Васюнину, С. Каленскому за помощь и плодотворное сотрудничество.

Литература

1. *Leung, C. M., Herbst, E., Huebner, W. F.* Search for Interstellar monohydric Thiols // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 1984. V. 56. P. 231.
2. *Herbst, E. & Leung, Ch. M.* Gas Phase Production of Complex Hydrocarbons, Cyanopolyynes, and Related Compounds in Dense Interstellar Clouds // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 1989. V. 69. P. 271.
3. *Васюнин, А. И., Соболев, А. М., Вубе, Д. З. и др.* О влиянии неточностей скоростей химических реакций на результаты астрохимического моделирования // *Письма в Астрон. журн.* 2004. Т. 30. С. 623.
4. *Vasyunin, A. I., Semenov, D., Henning, Th. et al.* Chemistry in protoplanetary disks: A sensitivity analysis // *Astrophys. J.* 2008. V. 672. P.629.
5. *Bergin, E. A., Langer, W. D., Goldsmith, P. F.* Gas-Phase Chemistry in Dense Interstellar Clouds Including Grain Surface Molecular Depletion and Desorption // *Astrophys. J.* 1995. V. 441. P. 222.
6. *Rawlings, J. M. C., Hartquist, T. W., Menten, K. M. et al.* Direct diagnosis of infall in collapsing protostars - I. The theoretical identification of molecular species with broad velocity distributions // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 1992. V. 255. P. 471.
7. *Viti, S. & Williams, D. A.* Chemical evolution ahead of Herbig-Haro objects // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 1999. V. 305. P. 755.
8. *Chakrabarti, S. & Chakrabarti, S. K.* Can DNA bases be produced during molecular cloud collapse? // *Astron. and Astrophys.* 2000. V. 354. L6.

9. *Shalabiea, O. M., Greenberg, J. M.* Chemical evolution of free-fall collapsing interstellar clouds: pseudo and real time dependent models // *Astron. and Astrophys.* 1995. V. 303. P.233.
10. *Awad, Z., Viti, S., Bayet, E. et al.* Deuterium chemistry of dense gas in the vicinity of low-mass and massive star-forming regions // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 2014. V. 275. P. 443.
11. *Tornow, C., Gast, P., Motschmann, U. et. al.* Water formation in early solar nebula: II-Collapsing cloud core // *Planetary and Space Science.* 2014. V. 233. P. 98.
12. *Tassis, K., Willacy, K., Yorke, H. W. et al.* Non-equilibrium Chemistry of Dynamically Evolving Prestellar Cores. I. Basic Magnetic and Non-magnetic Models and Parameter Studies // *Astrophys. J.* 2012. V. 753. ID. 29.
13. *Ceccarelli, C., Hollenbach, D J., Tielens, A G. G. M.* Far-Infrared Line Emission from Collapsing Protostellar Envelopes // *Astrophys. J.* 1996. V. 471. P. 400.
14. *Aikawa, Y., Herbst, E., Roberts, H. et al.* Molecular Evolution in Collapsing Prestellar Cores. III. Contraction of a Bonnor-Ebert Sphere // *Astrophys. J.* 2005. V. 620. P. 330.
15. *Garrod, R. T., Weaver, S. L. W., Herbst, E.* Complex Chemistry in Star-forming Regions: An Expanded Gas-Grain Warm-up Chemical Model // *Astrophys. J.* 2008. V. 283. P. 682.
16. *Vasyunina, T., Vasyunin, A. I., Herbst, E. et al.* Organic species in Infrared Dark Clouds // *Astrophys. J.* 2014. V. 85. P. 750.
17. *Das, A., Chakrabarti, S. K., Acharyya, K. et al.* Time evolution of simple

- molecules during proto-star collapse // *New Astronomy*. 2008. V. 13. P. 457.
18. *Shematovich, V.I., Shustov, B.M., Wiebe, D.S.* Self-consistent model of chemical and dynamical evolution of protostellar clouds // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 1997. V. 292. P.601.
 19. *Van Weeren, R. J., Brinch, C., Hogerheijde, M. R.* Modeling the chemical evolution of a collapsing prestellar core in two spatial dimensions // *Astron. and Astrophys.* 2009. V. 497. P. 773.
 20. *Lim, A. J., Rawlings, J. M. C., Williams, D. A.* Numerical hydrodynamics with a parallel integrated chemistry - I. A shear boundary layer // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 1999. V. 308. P. 1126.
 21. *Glover, S. C. O, Mac Low, M. M.* On the relationship between molecular hydrogen and carbon monoxide abundances in molecular clouds // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 2011. V. 412. P. 337.
 22. *Bruderer, S., Benz, A. O., Doty, S. D. et al.* Multidimensional Chemical Modeling of Young Stellar Objects. II. Irradiated Outflow Walls in a High-Mass Star-Forming Region // *Astrophys. J.* 2009. V. 700. P. 872.
 23. *Markwick, A. J., Millar, T. J., Charnley, S. B.* On the Abundance Gradients of Organic Molecules along the TMC-1 Ridge // *Astrophys. J.* 2000. V. 535. P. 256.
 24. *Acharyya, K., Hassel, G. E., Herbst, E.* The Effects of Grain Size and Grain Growth on the Chemical Evolution of Cold Dense Clouds // *Astrophys. J.* 2011. V. 15. P. 732.
 25. *Evans N. J., II, Dunham M. M., Jorgensen J. K. et. al.* The Spitzer c2d Legacy Results: Star-Formation Rates and Efficiencies; Evolution and Lifetimes // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2009. V. 181. P. 321.

26. *Vasyunin, A. I. & Herbst, E.* A Unified Monte Carlo Treatment of Gas-Grain Chemistry for Large Reaction Networks. II. A Multiphase Gas-surface-layered Bulk Model // *Astrophys. J.* 2013, V.762. ID.86
27. *Draine, B.T.* Photoelectric heating of interstellar gas // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 1978. V. 36. P. 595.
28. *Spitzer, L. J. & Tomasko, M. G.* Heating of H I Regions by Energetic Particles // *Astrophys. J.* 1968. V. 152. P. 971.
29. *Woodall, J., Agundez, M., Markwick-Kemper, A.J. et al.* The UMIST database for astrochemistry 2006 // *Astron. and Astrophys.* 2007. V. 466. P. 1197.
30. *Wakelam, V., Loison, J. C., Herbst, E. et al.* The 2014 KIDA Network for Interstellar Chemistry // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2015. V. 217. ID. 20.
31. *Вибе, Д.З., Шематович В.И., Шустов Б.М.* Химическая и динамическая эволюция протозвездных облаков. I. Начальные стадии коллапса // *Астрон. журн.* 1996. Т. 73. С. 702.
32. *В.И. Шематович, Д.З. Вибе и Б.М. Шустов.* Химическая и динамическая эволюция протозвездных облаков. Химия на ранней стадии коллапса // *Астрон. журн.* 1999. Т. 76. С. 738.
33. *Pavlyuchenkov, Ya., Wiebe, D., Launhardt, R. et al.* CB 17: Inferring the Dynamical History of a Prestellar Core with Chemodynamical Models // *Astrophys. J.* 2006. V. 645. P. 1212.
34. *Павлюченков, Я.Н., Вибе, Д.З., Фатеева А.М. и др.* Определение параметров массивных протозвездных облаков при помощи моделирования переноса излучения // *Астрон. журн.* 2011. Т. 88. С. 3.
35. *Hasegawa, T. I., Herbst, E., Leung, C. M.* Models of Gas-Grain

- Chemistry in Dense Interstellar Clouds with Complex Organic Molecules
// *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 1992. V. 82. P. 167.
36. *Hasegawa, T. I. & Herbst, E.* New gas-grain chemical models of quiescent dense interstellar clouds: the effects of H₂ tunnelling reactions and cosmic ray induced desorption // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 1993. V. 261. P. 83.
37. *Elias, J. H.* A study of the Taurus dark cloud complex. // *Astrophys. J.* 1978. V. 224. Part 1. P. 857.
38. *Schnee, S. & Goodman, A.* Density and Temperature Structure of TMC-1C from 450 and 850 Micron Maps // *Astrophys. J.* 2005. V. 624. P. 254.
39. *Kaifu, N., Ohishi, M., Kawaguchi, K.* A 8.8–50GHz Complete Spectral Line Survey toward TMC-1 I. Survey Data // *Publ. Astron. Soc. of Japan.* 2004. V. 56. P. 69.
40. *Churchwell, E., Winnewisser, G., Walmsley, C. M.* Molecular observations of a possible proto-solar nebula in a dark cloud in Taurus // *Astron. and Astrophys.* 1978. V. 67. P. 139.
41. *Little, L. T., Riley, P. W., MacDonald, G. H.* Association of cyanodiacetylene emission in Heiles 2 with a cloud collision? // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 1978. V. 183. P. 805.
42. *Wootten, A., Bozayan, E. P., Garrett, D. B.* Detection of C₂H in cold dark clouds // *Astrophys. J.* 1980. V. 239. P. 844.
43. *Snell, R. L., Langer, W. D., Frerking, M. A.* Determination of density structure in dark clouds from CS observations // *Astrophys. J.* 1982. V. 255. P. 149.

44. *Hirahara, Y., Suzuki, H., Yamamoto, S.* Mapping Observations of Sulfur-containing Carbon-Chain Molecules in Taurus Molecular Cloud 1 (TMC-1) // *Astrophys. J.* 1992. V. 394. P. 539.
45. *Little, L. T., MacDonald, G. H., Riley, P. W.* The relative distribution of ammonia and cyanobutadiyne emission in Heiles 2 dust cloud // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 1979. V. 189. P. 539.
46. *Guelin, M., Langer, W. D., Wilson, R. W.* The state of ionization in dense molecular clouds // *Astron. and Astrophys.* 1982. V. 107. P. 107.
47. *Ohishi, M., Irvine, W.M., Kaifu, N.* Molecular Abundance Variations among and Within Cold, Dark Molecular Clouds(rp) // *Proc. IAU Symp.* 150. Ed. P. D. Singh. Kluwer Academic Publishers. Dordrecht. 1992. P.171
48. *Semenov, D., Wiebe, D., Henning, Th.* Reduction of chemical networks. II. Analysis of the fractional ionisation in protoplanetary discs // *Astron. and Astrophys.* 2004. V. 417. P. 93.
49. *Roberts, H. & Herbst, E.* The abundance of gaseous H₂O and O₂ in cores of dense interstellar clouds // *Astron. and Astrophys.* 2002. V. 395. P. 233.
50. *Schnee, S., Caselli, P., Goodman, A. et al.* TMC-1C: An Accreting Starless Core // *Astrophys. J.* 2007. V. 671. P. 1839.
51. *Rygl, K. L. J., Brunthaler, A., Sanna, A. et al.* Parallaxes and proper motions of interstellar masers toward the Cygnus X star-forming complex. I. Membership of the Cygnus X region // *Astron. and Astrophys.* 2012. V. 539. ID A79.
52. *Araya, E. D., Kurtz, S., Hofner, P.* Radio Continuum and Methanol Observations of DR21(OH) // *Astrophys. J.* 2009. V. 698. P. 1321.
53. *Richardson, K. J., White, G. J., Phillips, J. P.* The structure and

- kinematics of the DR 21 region // Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 1986. V. 219. P. 167.
54. *Richardson, K. J., Sandell, G., Krisciunas, K.* Small-scale structure in the DR 21/DR 21 (OH) region: a high resolution continuum study at millimetre and submillimetre wavelengths // Astron. and Astrophys. 1989. V. 224. P. 199.
 55. *Mangum, J. G., Wootten, A., Mundy, L.G.* Synthesis Imaging of the DR 21(OH) Cluster. I. Dust Continuum and C 18O Emission // Astrophys. J. 1991. V. 378. P. 576.
 56. *Vallée, J.P. & Fiege, J.D.* A Cool Filament Crossing the Warm Protostar DR 21(OH): Geometry, Kinematics, Magnetic Vectors, and Pressure Balance // Astrophys. J. 2006. V. 636. P. 332.
 57. *Richardson, K. J., Sandell, G., Cunningham, C. T.* DR 21(OH), a cluster in the making. I. Observations in carbon monosulphide and methanol // Astron. and Astrophys. 1994. V. 286. P. 555.
 58. *Jakob, H., Kramer, C., Simon, R. et al* The cooling of atomic and molecular gas in DR21 // Astron. and Astrophys. 2007. V. 461. P. 999.
 59. *Hezareh, T., Houde, M., McCoey, C.* Simultaneous Determination of the Cosmic Ray Ionization Rate and Fractional Ionization in DR 21(OH) // Astrophys. J. 2008. V. 684. P. 1221.
 60. *Schneider, N., Csengeri, T., Bontemps, S.* Dynamic star formation in the massive DR21 filament // Astron. and Astrophys. 2010. V. 520. ID A49.
 61. *Woody, D.P., Scott, S. L., Scoville, N.Z. et al.* Interferometric Observations of 1.4 Millimeter Continuum Sources // Astrophys. J. 1989. V. 337. ID. L41.

62. *Norris, R. P., Booth, R. S., Diamond, P. J.* Interferometric observations of four protostellar OH maser sources // Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 1982. V. 201. P. 191.
63. *Genzel, R. & Downes, D.* H₂O in the Galaxy: sites of newly formed OB stars // Astron. and Astrophys. 1977. V. 30. P. 145.
64. *Batrla, W. & Menten, K. M.* Detection of a Strong New Maser Line of Methanol toward DR 21(OH) // Astrophys. J. 1988. V. 329. ID L117.
65. *Kalenskii, S. V. & Johansson L. E. B.* Spectral scan of the star-forming region DR21(OH). Observations and LTE analysis // Astron. Reports. 2010. V. 54. P. 295.
66. *Mangum, J. G., Wootten, A., Mundy, L. G.* Synthesis Imaging of the DR 21 (OH) Cluster. II. Thermal Ammonia and Water Maser Emission // Astrophys. J. 1992. V. 388. P. 467.
67. *Chandler, C. J., Gear, W. K., Chini, R.* Dust emission associated with DR 21 (OH) // Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 1993. V. 260. P. 337.
68. *Motte, F., Bontemps, S., Schilke, P. et al.* The earliest phases of high-mass star formation: a 3 square degree millimeter continuum mapping of Cygnus X // Astron. and Astrophys. 2007. V. 476. P. 1243.
69. *Peng, R., Yoshida, H., Chamberlin, R. A. et al.* A Comprehensive Survey of Hydrogen Chloride in the Galaxy // Astrophys. J. 2010. V. 723. P. 218.
70. *Mookerjee, B., Hassel, G. E., Gerin, M. et al.* Detection of a dense clump in a filament interacting with W51e2 // Astron. and Astrophys. 2014. V. 566. ID. A61.
71. *Zapata, L. A., Loinard L., Su, Y. N. et al.* Millimeter Multiplicity in DR21(OH): Outflows, Molecular Cores, and Envelopes // Astrophys. J. 2012. V. 744. P. 86.

72. *Harju, J., Winnberg, A., Wouterloot, J. G. A.* The distribution of OH in Taurus Molecular Cloud-1 // *Astron. and Astrophys.* 2000. V. 353. P. 1065.
73. *Garrod, R. T. & Herbst, E.* Formation of methyl formate and other organic species in the warm-up phase of hot molecular cores // *Astron. and Astrophys.* 2006. V. 457. P. 927.
74. *Van der Tak F.F.S., Black, J.H., Schoier, F.L. et al.* A computer program for fast non-LTE analysis of interstellar line spectra. With diagnostic plots to interpret observed line intensity ratios // *Astron. and Astrophys.* 2007. V. 468. P. 627.
75. *Mumma, M. J., Weaver, H. A., Larson, H. P.* The Ortho-Para Ratio of Water Vapor in Comet p/ Halley // *Astron. and Astrophys.* 1987. V. 187. P. 419.
76. *Wirstrom, E. S., Geppert, W. D., Hjalmanson, A. et al.* Observational tests of interstellar methanol formation // *Astron. and Astrophys.* 2011. V. 533. ID. A24.
77. *Krugel, E.* The physics of interstellar dust // *IoP Series in astronomy and astrophysics*, ISBN 0750308613. Bristol, UK: The Institute of Physics, 2003.
78. *Visser, R., van Dishoeck, E. F., Doty, S. D. et al.,* The chemical history of molecules in circumstellar disks. I. Ices // *Astron. and Astrophys.* 2009. V. 881. P. 495.
79. *Vasyunin, A. I., Semenov, D. A., Wiebe, D. S. et al.* A Unified Monte Carlo Treatment of Gas-Grain Chemistry for Large Reaction Networks. I. Testing Validity of Rate Equations in Molecular Clouds // *Astrophys. J.* 2009. V. 1459. P. 691.

80. *Herbst, E. & Shematovich, V. I.* New approaches to the modelling of surface chemistry on interstellar grains // *Astrophys. and Space Science.* 2003. V. 285. P. 725.
81. *Hasegawa, T. I., Herbst, E., Leung, C. M.* Models of Gas-Grain Chemistry in Dense Interstellar Clouds with Complex Organic Molecules // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 1992. V. 167. P. 82.
82. *Mathis, J. S., Rumpl, W., Nordsieck, K. H.* The size distribution of interstellar grains. // *Astrophys. J.* 1977. V. 425. P. 217.
83. *Weingartner, J. C. & Draine, B. T.* Dust Grain-Size Distributions and Extinction in the Milky Way, Large Magellanic Cloud, and Small Magellanic Cloud // *Astrophys. J.* 2001. V. 296. P. 548.
84. *Vasyunin, A. I., Wiebe, D. S., Birnstiel, T. et al.* Impact of Grain Evolution on the Chemical Structure of Protoplanetary Disks // *Astrophys. J.* 2011. V. 17. P. 727.
85. *Akimkin, V., Zhukovska, S., Wiebe, D. et al.* Protoplanetary Disk Structure with Grain Evolution: The ANDES Model // *Astrophys. J.* 2013. V. 24. P. 766.
86. *Pavlyuchenkov, Ya. N., Wiebe, D. S., Akimkin, V. V. et al.* Stochastic grain heating and mid-infrared emission in protostellar cores// *Monthly Not. Roy. Astron. Soc.* 2012. V. 2430. P. 421.
87. *Draine, B. T. & Lee, H. M.* Optical Properties of Interstellar Graphite and Silicate Grains // *Astrophys. J.* 1984. V. 89. P. 285.
88. *Bergin, E. A., Hogerheijde, M. R., Brinch, C. et al.* Sensitive limits on the abundance of cold water vapor in the DM Tauri protoplanetary disk // *Astron. and Astrophys.* 2010. V. 521. ID.L33.

89. *Le Boulrot, J., Pineau de Forêts, G., Roueff, E. et al.* Bistability in Dark Cloud Chemistry // *Astrophys. J.* 1993. V. 416. ID. L87.
90. *Le Boulrot, J., Pineau de Forêts, G., Roueff, E.* Complex dynamical behaviour in interstellar chemistry // *Astron. and Astrophys.* 1995. V. 297. P. 251.
91. *Viti, S., Roueff, E., Hartquist, T.W. et al.* Interstellar oxygen chemistry // *Astron. and Astrophys.* 2001. V. 370. P. 557.
92. *Lee, H.H., Roueff, E., Pineau des Forêts, G. et al.* Bistability in large chemical networks: a global view // *Astron. and Astrophys.* 1998. V. 334. P. 1047.
93. *Shalabiea, O. & Greenberg, J.M.* Bistability and dust/gas chemical modelling in dark interstellar clouds. // *Astron. and Astrophys.* 1995. V. 296. P. 779.
94. *Le Boulrot, J., Pineau de Forêts, G., Roueff, E. et al.* On the uniqueness of the solutions to the chemical rate equations in interstellar clouds: the gas-dust interface // *Astron. and Astrophys.* 1995. V. 302. P. 870.
95. *Boger, G.I. & Sternberg, A.* Bistability in Interstellar Gas-Phase Chemistry // *Astrophys. J.* 2006. V. 645. P. 314.
96. *Penteado, E.M., Cuppen, H.M., Rocha-Pinto, H.J.* Modelling the chemical evolution of molecular clouds as a function of metallicity // *Monthly Not. Roy. Astron. Soc.* 2014. V. 439. P. 3616.
97. *Bialy, S. & Sternberg, A.* CO/H₂, C/CO, OH/CO, and OH/O₂ in dense interstellar gas: from high ionization to low metallicity // *Monthly Not. Roy. Astron. Soc.* 2015. V. 450. P. 4424.
98. *Wakelam, V., Herbst, E., Le Boulrot, J. et al.* Sensitivity analyses of dense cloud chemical models // *Astron. and Astrophys.* 2010. V. 517. ID. A21.

99. *Albertsson, T., Semenov, D., Henning, Th.* Chemodynamical Deuterium Fractionation in the Early Solar Nebula: The Origin of Water on Earth and in Asteroids and Comets // *Astrophys. J.* 2014. V. 784. P. 39.
100. *Aikawa, Y., Miyama, S.M., Nakano, T. et al.* Evolution of Molecular Abundance in Gaseous Disks around Young Stars: Depletion of CO Molecules // *Astrophys. J.* 1996. V. 467. P. 684.
101. *Anders, E. & Grevesse, N.* Abundances of the elements: Meteoritic and solar // *Geochimica et Cosmochimica Acta.* 1989. V. 53. P. 197.
102. *Asplund, M., Grevesse, N., Sauval, J.A. et al.* The Chemical Composition of the Sun // *Annual Review Astron. and Astrophys.* 2009. V. 47. P. 481.
103. *Sonnentrucker, P., Neufeld, D.A., Phillips, T.G. et al.* Detection of hydrogen fluoride absorption in diffuse molecular clouds with Herschel/HIFI: an ubiquitous tracer of molecular gas // *Astron. and Astrophys.* 2010. V. 521. ID. L12.
104. *Bergin, E.A., Cleeves, L.I., Gorti, U. et al.* An old disk still capable of forming a planetary system // *Nature.* 2011. V. 493. P. 644.
105. *Van der Tak, F.F.S., Ossenkopf, V., Nagy, Z. et al.* Detection of HF emission from the Orion Bar // *Astron. and Astrophys.* 2012. V. 537. ID. L10.