ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ ИНСТИТУТ АСТРОНОМИИ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи УДК 524.523

Молярова Тамара Сергеевна

Химическая структура протопланетных дисков со стационарной и вспышечной аккрецией

01.03.02 — астрофизика и звёздная астрономия

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

к.ф.-м.н. В.В. Акимкин

Mockba - 2021

Оглавление

Введе	ние		5
Глава	1. Индикаторы массы протопланетных дисков		20
1.1	Введение		21
1.2	Описание модели		25
	1.2.1 Физическая модель диска		26
	1.2.2 Химическая модель		29
	1.2.3 Набор моделей		32
1.3	Поиск индикаторов массы		33
1.4	Распределение углерода по молекулам		43
	1.4.1 Химическое разрушение СО		45
1.5	Влияние параметров модели на содержание молекул .		50
	1.5.1 Структура диска		50
	1.5.2 Начальное соотношение С/О		52
1.6	Обсуждение результатов		54
1.7	Положение, выносимое на защиту		57
Глава	2. Влияние вспышек светимости звёзд типа FU (Эриона	a
на	химический состав протопланетных дисков		58
2.1	Вспышки аккреции у молодых звёздных объектов		59
2.2	Модель диска со вспышкой		62
	2.2.1 Модель вспышки		62
	2.2.2 Особенности физической и химической моделей	•••	63
	2.2.3 Набор моделей		67
2.3	Содержание молекулы СО		67

2.4	Сравнение с другими моделями					
2.5	Моле	кулы — индикаторы вспышки	72			
	2.5.1	Индикаторы текущей вспышки	72			
	2.5.2	Индикаторы прошедшей вспышки	78			
	2.5.3	Двумерная химическая структура диска	85			
	2.5.4	Нестандартное поведение молекул	91			
2.6	Полог	кения, выносимые на защиту	92			
Глава	3. Ди	намика летучих соединений в протопланетных				
дис	сках		93			
3.1	Введе	ение	94			
3.2	Фазон	зые переходы летучих соединений	97			
	3.2.1	Тепловая десорбция	98			
	3.2.2	Фотодесорбция	100			
	3.2.3	Адсорбция	102			
	3.2.4	Тестирование модели	102			
3.3	Динал	мическая модель диска с летучими соединениями	107			
	3.3.1	Модификация модели роста пыли	109			
	3.3.2	Обмен ледяными мантиями при эволюции пыли	112			
	3.3.3	Влияние ледяных мантий на фрагментацию пыли	112			
3.4	Глоба	льная структура диска	114			
3.5	Распр	ределение и динамика летучих соединений	118			
	3.5.1	Линии льдов	119			
	3.5.2	Влияние вспышек светимости	124			
	3.5.3	Вариации содержания летучих в разных фазах	125			
	3.5.4	Двумерные распределения летучих	129			
3.6	Толщ	ина и состав ледяных мантий	132			
3.7	Обсуждение результатов					
3.8	Полох	жения, выносимые на защиту	138			

Заключение	139
Литература	142
Приложение 1	163
Приложение 2	166

Введение

Протопланетный диск — это уплощённый вращающийся объект из газа и пыли, который образуется вместе с протозвездой в процессе коллапса межзвёздного молекулярного облака. Считается, что именно в протопланетных дисках образуются планеты. В частности, из подобного диска, называемого протосолнечной туманностью, образовалась планеты нашей Солнечной системы. Интерес к исследованию протопланетных дисков в последние годы возрастает благодаря появлению новых наблюдательных данных. Во-первых, огромное разнообразие обнаруженных экзопланет порождает новые вопросы об их формировании. Во-вторых, новые инфракрасные и субмиллиметровые инструменты, такие как Herschel, SMA, ALMA, NOEMA и др., позволили получить детальные изображения самих протопланетных дисков, в том числе в линиях излучения молекул, с хорошим пространственным и спектральным разрешением [1–3].

Протопланетные диски формируются в процессе коллапса молекулярного облака и наследуют из него вещество: газ, пыль и ледяные мантии, покрывающие пылинки. Однако это вещество продолжает в диске активную эволюцию, и химический состав протопланетных дисков существенно отличается от состава родительского молекулярного облака.

Химический состав протопланетного диска интересен по многим причинам. Он содержит информацию о происходящих в диске процессах. Некоторые химические компоненты являются активными участниками этих процессов, определяя скорости нагрева и охлаждения, а также эффективность взаимодействия вещества диска с магнитным полем. Кроме того, химическая эволюция диска может отразиться на составе образующихся планет. Например, содержание молекул в атмосферах газовых гигантов может зависеть от механизма формирования этих планет и количества углерода и кислорода в веществе, из которого они образовались [4,5], а содержание в диске воды может влиять на формирование и эволюцию планет земной группы [6].

Наблюдение и анализ излучения молекул позволяют диагностировать физические характеристики диска, необходимые для понимания его строения и эволюции: массу диска, его кинематическую структуру, степень ионизации вещества и др. Молекулярный состав диска зависит от массы и светимости центральной звезды, размера и массы самого диска, параметров ансамбля пыли, состава исходного вещества, наличия эпизодических вспышек аккреции. Поэтому для интерпретации наблюдательных данных необходимо уметь рассчитывать содержание химических соединений и их распределение по диску, т.е. строить химическую модель диска, учитывая все существенные параметры диска и центральной звезды.

Для решения данной задачи прибегают к астрохимическому моделированию. Оно является важным инструментом исследования межзвёздной и околозвёздной среды [7–9]. Характерные для протопланетных дисков высокие плотности, низкие температуры и поле излучения, характеризующееся высокой плотностью достаточно энергичных фотонов, а также активная эволюция пыли способствуют разнообразию химического состава [10]. Для описания физической структуры протопланетных дисков и расчёта эволюции их химического состава создаются специализированные физикохимические модели, такие как ProDiMo [11], DALI [12], ANDES [13].

Астрохимические модели протопланетных дисков [11–13] подробно описывают химические процессы, но при этом предполагают упрощённую структуру диска, в основном квазистационарную и осесимметричную. Включение химии в динамические модели, учитывающие самогравитацию и динамику газа и пыли, требует больших вычислительных мощностей. Существуют такие модели, позволяющие подробно рассмотреть эволюцию

6

диска на временах порядка тысяч лет [14]. Для рассмотрения более длинных временных шкал (сотни тысяч лет) используют, модели с ограниченным набором химических процессов, например [15].

Одной из важных особенностей молодых звёзд с протопланетными дисками являются отмечающиеся у некоторых из них эпизодические вспышки аккреции [16]. Сопутствующее увеличение аккреционной светимости может существенно повлиять на химический состав диска и на его физические параметры [17]. Теоретическое моделирование процессов аккреции в дисках приводит к выводу, что подобные вспышки должны происходить у большинства молодых звёздных объектов [18]. Однако в большинстве случаев изменение светимости не находит отражения в наблюдениях из-за продолжительных периодов спокойной аккреции между вспышками. Тем не менее, состав дисков, испытывающих или испытывавших в прошлом такие вспышки, может заметно отличаться от состава спокойных дисков, что открывает перспективу выявления таких дисков по химическим индикаторам.

Моделирование зависимости состава газа и льда в протопланетных дисках от различных параметров, в том числе при разных режимах аккреции, является эффективным инструментом исследования в современной астрофизике. Оно необходимо для интерпретации наблюдательных данных и построения (совершенствования) теории эволюции протопланетных дисков, в том числе в контексте образования планет. Данная диссертационная работа посвящена изучению свойств протопланетных дисков методом моделирования химического состава протопланетных дисков в рамках нескольких подходов, охватывающих с разных сторон химические и динамические процессы в дисках.

7

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения. Число страниц в диссертации 168, рисунков 29, таблиц 7. Список литературы содержит 193 наименования.

Во Введении представлен краткий обзор предмета исследования и содержания диссертационной работы. Описаны актуальность диссертационной работы, её цели и задачи, новизна полученных результатов, их научная и практическая значимость. Представлена информация по апробации результатов, научным публикациям по результатам исследований соискательницы и её вкладе в работу.

В Главе 1 представлены методика и результаты моделирования ансамбля протопланетных дисков с различными параметрами с целью систематического поиска перспективных молекулярных индикаторов массы диска.

Масса протопланетного диска является одним из его важнейших параметров. Для её определения часто применяется излучение в линиях молекул. В частности, используют молекулу CO, которая имеет высокую концентрацию, легко наблюдаемые вращательные переходы, а также относительно простую химию. Ожидаемое содержание этой молекулы в газе хорошо известно для условий межзвёздной среды, однако для дисков фактор конверсии наблюдаемого CO в массу диска может заметно отличаться.

Данная глава посвящена теоретическому исследованию применимости молекулы СО в качестве индикатора массы протопланетных дисков с точки зрения зависимости её относительного содержания от параметра диска. Также анализируется содержание других химических соединений, потенциально претендующих на роль индикаторов массы. Оценивается разброс значений полного содержания различных молекул в диске в зависимости от структурных параметров диска. Для расчётов используется астрохимическая модель квазистационарного протопланетного диска ANDES [13].

В разделе 1.1 даётся обзор применения молекулы СО для определения массы протопланетных дисков. В разделе 1.2 описывается используемая астрохимическая модель протопланетного диска. В разделе 1.3 выделяются молекулы, подходящие на роль индикаторов массы. Анализируется распределение углерода по молекулам (раздел 1.4), химические процессы, определяющие химическую структуру диска (раздел 1.4.1), и влияние параметров модели на содержание молекулы СО (раздел 1.5). В разделе 1.6 даётся интерпретация полученных результатов.

Глава 2 посвящена исследованию воздействия вспышек светимости типа FU Ориона (фуоров) на химический состав протопланетных дисков.

Вспышки светимости различной амплитуды наблюдаются у многих молодых звёздных объектов. Нестационарность химических процессов, происходящих во время вспышки, может приводить к появлению или исчезновению характерных соединений. Химический состав меняется не мгновенно и может сохранять отпечаток вспышки даже после её окончания. Выделение особенностей химического состава протопланетных дисков, испытавших в прошлом влияние вспышки фуора, необходимо, чтобы идентифицировать такие объекты в наблюдениях.

В данной главе исследуется, как эволюционирует химический состав диска вокруг фуора под действием вспышки светимости. С помощью астрохимической модели ANDES анализируется, как вспышка светимости влияет на химический состав вещества и как быстро он возвращается к исходному (довспышечному) составу после её окончания. Также исследуется пространство параметров и идентифицируются соединения, содержание которых наиболее чувствительно к вспышке светимости, в особенности соединения, сохраняющиеся в диске на больших временных масштабах.

В разделе 2.1 приводится обзор наблюдательных проявлений фуоров

и сопутствующих изменений в свойствах протопланетных дисков. Особенности применяемой модели описаны в разделе 2.2. Далее проводится сравнение с результатами предыдущих работ (разделы 2.3 и 2.4), выделяются наиболее чувствительные к вспышке соединения, рассматриваются их распределения по диску (раздел 2.5).

Глава 3 посвящена исследованию структуры динамического газопылевого диска с ограниченным набором химических соединений и реакций.

Эволюция протопланетных дисков на ранних стадиях эволюции характеризуется существенным влиянием различных динамических процессов. В дисках развивается гравитационная неустойчивость, образуются спирали и сгустки, активно растёт и дрейфует пыль, вещество аккрецирует на звезду. Эти процессы могут оказывать влияние на химический состав диска, однако в предыдущих главах в целях более детального рассмотрения химической эволюции диска они игнорировались.

В данной главе рассматривается динамическая эволюция в диске содержания наиболее обильных летучих молекул — H₂O, CO₂, CH₄ и CO находящихся в газовой и ледяной фазах. Представлена обновлённая двумерная модель самогравитирующего протопланетного диска с эволюцией пыли FEOSAD [19], в которую добавлен модуль эволюции летучих соединений с учётом их влияния на фрагментацию пыли. По результатам моделирования анализируется состав ледяных мантий пылинок и его изменение, а также влияние наличия ледяных мантий на эволюцию пыли.

Принятая модель перехода летучих соединений между газовой фазой и ледяными мантиями подробно описана в разделе 3.2. Основные свойства модели диска и особенности включения в неё летучих представлены в разделе 3.3. Проанализированы полученные в моделях распределения газа и пыли (раздел 3.4), распределения летучих соединений (раздел 3.5) и состав ледяных мантий пылинок (раздел 3.6).

В Заключении представлены основные результаты диссертацион-

ной работы. Даны рекомендации для дальнейшего развития темы диссертации.

В **Приложениях 1 и 2** представлены дополнительные материалы по Главе 1 и Главе 2, соответственно.

Цели диссертационной работы

- Поиск молекулярных индикаторов массы протопланетных дисков на основе астрохимического моделирования ансамбля квазистационарных моделей с различными параметрами диска и центральной звезды;
- Поиск индикаторов вспышки светимости типа FU Ориона химических соединений, содержание которых в диске значительно возрастает во время вспышки, а также остаётся повышенным в течение продолжительного времени после её окончания;
- Анализ распределения по протопланетному диску основных летучих соединений в газовой и ледяной фазах в рамках двумерного гидродинамического моделирования с учётом самогравитации и эволюции пыли.

Задачи

- Создание ансамбля моделей протопланетных дисков с различными параметрами. Проведение расчётов химического состава для ансамбля моделей.
- 2. Поиск корреляций между массой диска и рассчитанным полным содержанием в нём различных соединений. Выявление потенциальных индикаторов массы на основе этих данных, анализ наблюдательных перспектив для отобранных молекул.

- Модификация модели для расчёта химического состава протопланетного диска, испытывающего вспышку светимости типа FU Ориона. Проведение вычислений для моделей с различными параметрами.
- Сравнение рассчитанных содержаний соединений до, во время и после вспышки. Поиск соединений, наиболее чувствительных к вспышке, анализ путей их формирования и разрушения при вспышке и их чувствительности к параметрам модели.
- 5. Разработка и внедрение в существующую газодинамическую модель протопланетного диска модуля, описывающего фазовые превращения летучих соединений и влияние наличия льдов на поверхности пыли на её эволюцию.
- Проведение численных расчётов и анализ полученных распределений по диску различных параметров газа и пыли: поверхностных плотностей газа и пыли, их скоростей, размера пыли, температуры и т.д.
- Анализ содержания летучих соединений в газе и на поверхности пыли, их влияния на эволюцию пыли, а также роли динамических процессов в эволюции самих летучих соединений.

Научная новизна

В данной диссертационной работе впервые проведён систематический поиск индикаторов массы протопланетных дисков на основе астрохимического моделирования ансамбля протопланетных дисков. Обосновано применение в качестве индикатора массы дисков молекулы СО, даны оценки содержания в дисках газофазного СО, описаны причины и особенности вариаций содержания СО в дисках.

Впервые проведён систематический анализ влияния вспышки фуора на содержание в протопланетном диске различных, в том числе сложных

органических, молекул в рамках детальной астрохимической модели диска. Даются рекомендации по наблюдению молекул в дисках, испытывающих и испытывавших в прошлом вспышки светимости.

В рамках численной модели впервые описана динамика летучих соединений в самогравитирующем протопланетном диске с эволюцией пыли. Проанализировано влияние ледяных мантий на эволюцию пыли в дисках с высокой и низкой турбулентностью.

Научная и практическая значимость

Результаты анализа применимости различных молекул в качестве индикаторов массы протопланетных дисков могут использоваться другими исследователями для определения массы дисков из наблюдений. Выводы о содержании СО в дисках могут применяться для учёта химического разрушения СО при определении массы газа по наблюдению СО.

Предложенные списки молекул, чувствительных к вспышкам светимости, могут использоваться для идентификации признаков прошлой вспышечной активности у объектов, в настоящее время не проявляющих значительных вариаций светимости.

Обновлённая версия гидродинамического кода для моделирования протопланетных дисков FEOSAD, включающая динамику летучих соединений, может использоваться для дальнейшего теоретического исследования содержания льдов в протопланетных дисках и их влияния на эволюцию пыли. Выводы о накоплении летучих соединений на линиях льдов, расчёты состава ледяных мантий и их влиянии на эволюцию пыли могут использоваться для дальнейшего развития теоретических моделей роста пыли и образования планет.

Методология и методы исследования

Задачи диссертации решались при помощи численного моделирования кодами ANDES [13] и FEOSAD [19]. Расчёты проводились на вычислительном кластере ИНАСАН и на Венском научном кластере (VSC). Результаты анализировались с помощью авторского программного обеспечения.

Достоверность представленных результатов

Достоверность представленных в диссертационной работе результатов исследования химического состава протопланетных дисков со стационарной и вспышечной аккрецией подтверждается сравнением с теоретическими и наблюдательными данными других авторов и обсуждением полученных результатов на конференциях и семинарах. Результаты опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК.

Личный вклад автора

Соискательница лично участвовала в постановке задач, написании кода, получении и обработке результатов численных экспериментов, совместно с соавторами участвовала в обсуждении результатов и формулировке выводов.

В частности, соискательницей:

- 1. Выбраны параметры ансамбля моделей протопланетных дисков, разработан способ задания вспышки светимости.
- 2. Разработан и внедрён в код FEOSAD модуль расчёта адсорбции и десорбции летучих соединений. Добавлена обновлённая модель эволюции пыли.
- 3. Проведены все расчёты кодами ANDES и FEOSAD.

- 4. Разработаны методы анализа результатов моделирования и критерии отбора перспективных индикаторов массы дисков и вспышек фуоров.
- 5. Проанализированы полученные в модели FEOSAD распределения льдов и газофазных соединений, дана теоретическая интерпретация накопления летучих соединений на линиях льдов.

Положения, выносимые на защиту по результатам диссертационной работы

- Показано, что молекула СО является наиболее адекватным молекулярным индикатором массы протопланетных дисков. Показано, что средняя концентрация СО в дисках составляет 1.6 × 10⁻⁵ по отношению к H₂, что на порядок ниже, чем в молекулярных облаках. Показано, что при определении масс дисков по СО пренебрежение химическим разрушением СО может приводить к в среднем трёхкратной недооценке массы дисков.
- Показано, что во время вспышки фуора содержание многих соединений, в том числе сложных органических молекул, повышается на несколько порядков, благодаря чему они могут быть задетектированы. Предсказанные вспышечные содержания молекул CH₃CHO и HCOOCH₃ хорошо согласуются с полученными впоследствии на ALMA независимыми наблюдательными данными для фуора V 883 Ориона.
- Определены молекулы, высокое содержание которых в дисках может свидетельствовать о прошлой вспышечной активности молодого звёздного объекта. Установлено, что содержание H₂CO, NH₂OH, CH₃CHO, CH₃OCH₃, HCOOCH₃, C₃H₃ и C₂H₂ остаётся повышенным от десятков до тысяч лет после окончания вспышки.

- Разработана модель адсорбции и десорбции летучих соединений для многокомпонентной модели пыли. Модель добавлена в двумерный гидродинамический код FEOSAD, что обеспечило возможность рассматривать совместную динамику газа, пыли и льдов в протопланетных дисках. С помощью данной модели показано, что при высокой турбулентности ледяные мантии вызывают заметное изменение свойств пыли в окрестности линии льдов воды.
- Показано, что льды попадают на крупную пыль, главным образом, в результате коагуляции обледеневших мелких пылинок. Вдоль линий льдов накапливаются газофазные и ледяные летучие соединения, при этом повышение их содержания относительно среднего уровня может достигать двух порядков величины.

Апробация

Результаты диссертации были представлены на российских и зарубежных конференциях и семинарах в качестве устных и стендовых докладов:

- 46-я студенческая научная конференция «Физика Космоса» (Коуровская астрономическая обсерватория УрФУ, Екатеринбург, 30 января – 03 февраля 2017);
- XIV Конференция молодых учёных «Фундаментальные и прикладные космические исследования» (ИКИ РАН, Москва, 12–14 апреля 2017);
- Current and Future Perspectives of Chemical Modelling in Astrophysics (UHH, Hamburg, July 15th–17th, 2017);
- Planet Formation and Evolution, (AIU Jena, Jena, September 25–27, 2017);

- 5. Конкурс молодых учёных ИНАСАН (ИНАСАН, Москва, 03 ноября 2017);
- Конференция «Звездообразование и планетообразование. Наблюдения, теория, численный эксперимент.» (АКЦ ФИАН, Москва, 13–15 ноября 2017);
- 7. 47-я студенческая научная конференция "Физика Космоса" (Коуровская астрономическая обсерватория УрФУ, Екатеринбург, 29 января 02 февраля 2018);
- VII Пулковская молодёжная астрономическая конференция (ГАО РАН, Санкт-Петербург, 28–31 мая 2018);
- XXXth General Assembly of the International Astronomical Union, IAU Symposium 345: Origins: From the Protosun to the First Steps of Life (University of Vienna, Vienna, Austria, August 20–23, 2018);
- 10. Seminar at Konkoly Observatory (Budapest, Hungary, October 25, 2018);
- Конкурс молодых учёных ИНАСАН (ИНАСАН, Москва, 15 ноября 2018);
- Конференция «Звездообразование и планетообразование» (АКЦ ФИ-АН, Москва, 12–13 ноября 2019);
- Семинар лаборатории астрохимии и внеземной физики УрФУ (УрФУ, Екатеринбург, 8 мая 2020, онлайн);
- Международная школа и рабочее совещание «Исследования экзопланет 2020» для молодых учёных и студентов (ИНАСАН, Москва, 9–12 октября 2020, онлайн);
- Конкурс молодых учёных ИНАСАН (ИНАСАН, Москва, 5 ноября 2020);

- Конференция «Звездообразование и планетообразование» (АКЦ ФИ-АН, Москва, 10–11 ноября 2020, онлайн);
- 17. Online conference 'Five years after HL Tau: a new era in planet formation' (Chile, December 7–11, 2020);
- Online workshop 'Accretion and luminosity bursts across the stellar mass spectrum' (Southern Federal University, December 15–16, 2020).

Публикации по теме диссертации

Основные результаты работы опубликованы в рецензируемых научных изданиях, из них 4 — в журналах, рекомендованных ВАК.

Статьи в журналах, рекомендованных ВАК:

- [A1] Molyarova T., Akimkin V., Semenov D., Henning Th., Vasyunin A., Wiebe D. Gas mass tracers in protoplanetary disks: CO is still the best // The Astrophysical Journal. - 2017. - V. 849. - No. 2. - A130.
- [A2] Molyarova T., Akimkin V., Semenov D., Ábrahám P., Henning Th., Kóspál Á., Vorobyov E., Wiebe D. Chemical Signatures of the FU Ori Outbursts // The Astrophysical Journal. — 2018. — V. 866. — No. 1. — A46.
- [A3] Wiebe D. S., Molyarova T. S., Akimkin V. V., Vorobyov E. I., Semenov D. A. Luminosity outburst chemistry in protoplanetary discs: going beyond standard tracers // MNRAS - 2019. - V. 485. - Pp. 1843-1863.
- [A4] Molyarova T., Vorobyov E. I., Akimkin V., Skliarevskii A., Wiebe D., Güdel M. Gravitoviscous protoplanetary disks with a dust component.
 V. The dynamic model for freeze-out and sublimation of volatiles // The Astrophysical Journal. - 2021. - V. 910. - No. 2. - A153.

Другие публикации автора по теме диссертации

- [B1] Молярова Т. С., Акимкин В. В., Шустов Б. М. Химический состав льдов в протопланетных дисках // Сборник трудов мемориальной конференции 2018 г., посвященной памяти академика А. А. Боярчука. Под ред. Д. В. Бисикало, Д. З. Вибе. — 2018. — С. 328-333.
- [B2] Молярова Т. С., Элбакян В. Г. Химический отклик вспышек аккреции в погружённых фуорах // Научные труды Института астрономии РАН. Том 4. — 2019. — Т. 4 — С. 45-49.
- [B3] Молярова Т. С., Вибе Д. З. Сопоставление наблюдаемых содержаний сложной органики в V 883 Ori с результатами астрохимического моделирования // Научные труды Института астрономии РАН. Том 4. — 2019. — Т. 4 — С. 50-55.
- [B4] Molyarova T., Akimkin V., Semenov D., Ábrahám P., Henning Th., Kóspál Á., Vorobyov E., Wiebe D. Chemical modeling of FU Ori protoplanetary disks // Origins: From the Protosun to the First Steps of Life. Proceedings of the International Astronomical Union. - 2020. -V. 345. - Pp. 367-368.
- [B5] Молярова Т. С., Акимкин В. В., Воробъёв Э. И. Распределение летучих соединений в самогравитирующем протозвёздном диске // Научные труды Института астрономии РАН. Том 4. — 2019. — Т. 4 — С. 40-44.

Глава 1. Индикаторы массы протопланетных дисков

Одним из важнейших параметров протопланетного диска является его масса. Она определяет количество вещества, потенциально доступного для образования планет, от неё зависит, насколько важный вклад в динамическую эволюцию диска вносит гравитационная неустойчивость.

Для определения полной массы протопланетного диска часто применяют наблюдения излучения в линиях молекул. В частности, в качестве индикатора массы используют молекулу CO, которая имеет высокую концентрацию, легко наблюдаемые вращательные переходы, а также относительно простую химию. Ожидаемое содержание этой молекулы в газе относительно хорошо известно для условий межзвёздной среды, однако фактор конверсии наблюдаемого CO в массу для дисков может заметно отличаться.

Данная глава посвящена теоретическому исследованию применимости молекулы СО в качестве индикатора массы протопланетных дисков с точки зрения зависимости её относительного содержания от параметров диска. Анализируется также содержание других химических соединений, потенциально претендующих на роль индикаторов массы. Оценивается разброс значений полного содержания различных молекул в зависимости от структурных параметров диска.

В разделе 1.1 даётся обзор применения молекулы СО для определения массы протопланетных дисков. В разделе 1.2 описывается используемая астрохимическая модель протопланетного диска. В разделе 1.3 выделяются молекулы, подходящие на роль индикаторов массы. Анализируется распределение углерода по молекулам (раздел 1.4), химические процессы, определяющие химическую структуру диска (раздел 1.4.1), и влияние параметров модели на содержание молекулы СО (раздел 1.5). В разделе 1.6 даётся интерпретация полученных результатов. Основные результаты исследования опубликованы в статье [A1].

1.1. Введение

На ранних стадиях эволюции звёзды, подобные Солнцу, окружены сплюснутым вращающимся облаком из газа и пыли — так называемым протопланетным диском. Термин «протопланетный диск» подразумевает, что именно в этих объектах образуются планеты. В настоящее время есть лишь косвенные указания на протекание в них этого процесса (см., например, обзоры [20,21]), хотя вокруг звезды PDS 70 с более поздним «переходным диском» сформировавшиеся планеты уже были обнаружены [22–24]. Сформулировано несколько различных сценариев образования планет, однако ясно, что в этом процессе масса протопланетного диска является одним из ключевых параметров [25,26]. Поэтому получение точных оценок масс протопланетных дисков из наблюдений является одной из важнейших, хотя и непростых задач в изучении образования и эволюции планетных систем.

Существует два основных подхода к измерению масс дисков. Чаще всего для этого используют наблюдения теплового излучения пыли. Если это излучение является оптически тонким, что обычно выполняется в миллиметровом и субмиллиметровом диапазоне, то полную массу пыли в диске можно вычислить путём интегрирования потока в континууме [20, 27]. Массу диска затем получают, предполагая стандартное для межзвёздной среды соотношение 100:1 между массами газа и пыли [28], что совсем необязательно применимо для дисков [29]. Однако, чтобы применить этот метод, необходимо знать распределение температуры в диске, поскольку один и тот же поток излучения может соответствовать как большой массе холодной пыли, так и ме́ньшей массе горячей. Кроме того, необходимо сделать некоторое исходное предположение об оптических свойствах пыли, которые для пыли в протопланетных дисках достоверно не известны и к тому же могут меняться в процессе эволюции диска [30,31]. Массовая доля пыли в дисках также может отличаться от значения, определённого для межзвёздной среды. Также диски могут быть оптически толстыми в миллиметровом диапазоне [2]. Совокупность этих ограничений приводит к тому, что массы протопланетных дисков, определённые по излучению пыли, могут недооцениваться [32,33].

Более прямым методом массы протопланетных дисков можно определить по наблюдениям в эмиссионных линиях молекул. Здесь и далее для краткости под молекулами или соединениями в протопланетных дисках будут пониматься химические соединения в общем смысле: молекулы, ионы, атомы, электроны и радикалы. Большую часть массы диска составляют молекулярный водород H₂ и гелий He, которые сложно наблюдать напрямую (за исключением ограниченных областей диска [34]). Поэтому в качестве индикаторов массы используют другие молекулы, для которых содержание относительно молекулярного водорода известно из астрохимического моделирования и наблюдений межзвёздной среды.

В этом отношении подходящим кандидатом является дейтерированный водород HD [35, 36], изотополог молекулярного водорода, который хорошо перемешан с газом и имеет довольно высокое содержание по отношению к молекулярному водороду 3×10^{-5} [35]. При этом из-за разницы в химии водорода и дейтерия может возникать химическое фракционирование: дейтерий преимущественно встраивается в определённые молекулы и не встраивается в другие. Это несколько смещает относительное содержание HD, из-за чего использование этой молекулы в качестве индикатора массы может приводить к неопределённости порядка фактора 3 [37]. Главным ограничением применения HD является наблюдательная сложность: из-за непрозрачности атмосферы в дальнем ИК наблюдение возможно только с помощью внеатмосферных инструментов. После вывода из эксплуатации телескопа *Herschel* наблюдение вращательных переходов HD потенциально возможно только на обсерватории SOFIA при условии наличия на ней соответствующего спектрографа.

Наиболее широко в качестве молекулярного индикатора массы газа применяется монооксид углерода или угарный газ — молекула СО. Это одна из наиболее распространённых в межзвёздной среде молекул, которая к тому же обладает легко наблюдаемыми вращательными переходами. Обычно линии излучения СО используют для определения массы водорода в диффузных облаках [38,39], а в последнее время их стали часто использовать и для протопланетных дисков [29,40–42]. Наблюдение внутренних областей дисков [43] и астрохимическое моделирование [44] показывают содержание ~ 10^{-4} по отношению к H₂, что согласуется со значением, определённым для MЗС [45].

Однако с определением массы водорода по излучению СО тоже есть трудности. Во-первых, из-за высокого относительного содержания молекулы её излучение зачастую оптически толстое [43], что можно преодолеть, если наблюдать менее распространённые и потому более оптически тонкие изотопологи СО: ¹³CO, C¹⁸O, C¹⁷O [46], или даже ¹³C¹⁸O, недавно обнаруженный в диске вокруг HL Тельца [47]. Во-вторых, в холодных и плотных физических условиях, характерных для плоскости протопланетного диска, СО и его изотопологи вымерзают в виде льда на поверхности пылинок и становятся ненаблюдаемыми [10, 48].

Тем не менее, за отсутствием альтернатив массы протопланетных дисков по наблюдениям в линиях молекул определяют в основном именно по CO. Для корректного использования этой молекулы в качестве индикатора массы помимо расчёта переноса излучения необходимо вводить теоретическое описание химических процессов. В работе [40] авторы моделируют ансамбль протопланетных дисков, предполагая, что CO замерзает при температуре ниже 20 К и фотодиссоциирован УФ излучением, если лучевая концентрация H_2 над ним не превышает $1.3 \times 10^{21} \text{ см}^{-2}$. В незатронутых этими процессами участках диска содержание СО относительно водорода авторами принималось равным значению 10^{-4} , типичному для межзвёздной среды [45]. С учётом этих предположений, утверждается [40], что масса СО в указанной тёплой области диска составляет значительную долю полной массы СО и поэтому позволяет определить полную массу газа в диске.

Полученные таким образом массы дисков оказываются систематически ниже, чем массы, определённые по излучению пыли. Обзоры протопланетных дисков в областях звездообразования в Волке, Хамелеоне, Орионе и др. [29,49], сделанные по наблюдениям на субмиллиметровом интерферометре ALMA, показывают высокое (~1:10) отношение массы пыли к массе газа, определённой с помощью вышеописанной теоретической модели [40].

Различия между массами, определёнными по СО и по пыли, могут быть вызваны реальным увеличением относительной доли пыли в диске в процессе его эволюции. Также они могут возникать вследствие неопределённостей в соотношении между газофазным СО и молекулярным водородом, если существуют неучтённые в модели способы разрушения СО [40]. Вторая возможность была рассмотрена в работе [41] в модели, учитывающей химию изотопов с помощью искусственного понижения содержания углерода. Среди рассмотренных авторами химических реакций на поверхности пылинок были только простые процессы гидрогенизации, которые могли незначительно уменьшить содержание газофазного СО. Авторы показали, что неопределённость в определении масс по СО может быть уменьшена при наличии информации о структуре диска. В продолжении этого исследования показано, что причиной расхождений в массах дисков, определённых разными способами, может быть использование упрощённых химических моделей [50].

Более детальное химическое моделирование [51] показало, что даже внутри линии льдов CO его газофазное содержание может быть значительно понижено за счёт химического преобразования этой молекулы в другие, менее летучие соединения, такие как CO₂ и сложные органические молекулы, формирование которых характерно для различных этапов звездообразования [52]. Однако в исследовании [51] рассматривались лишь внутренние области дисков (внутри 70 а.е.) для небольшого числа моделей. Кроме того, авторы [51] предполагали, что пыль в диске уже существенно проэволюционировала и частицы пыли значительно выросли по сравнению с межзвёздной пылью, что сокращает суммарную площадь их поверхности и ограничивает эффективность вымерзания молекул и скорость поверхностных реакций, в том числе конвертации CO в другие молекулы. В последующей работе [53] было показано, что химическое разрушение CO может приводить к существенной недооценке масс протопланетных дисков.

Несмотря на то, что CO как индикатор массы изучался довольно широко, систематических исследований его содержания в протопланетных дисках с различной структурой в рамках детального астрохимического моделирования прежде не проводилось. Именно такое исследование проведено в рамках диссертационной работы. Также в данной работе рассматриваются содержания других химических соединений в различных моделях и их корреляция с массой диска с целью выявления других соединений, потенциально применимых в качестве индикаторов массы диска.

1.2. Описание модели

В данной работе моделируется химический состав протопланетных дисков с различными структурными параметрами. Для этого используется астрохимический код ANDES [13] с подробной сеткой химических реакций [54]. Двумерная модель в координатах R, z (R — расстояние до оси вращения диска, z — высота над плоскостью диска) описывает гидростатический осесимметричный протопланетный диск без оболочки. Химическая модель в рамках уравнений химической кинетики описывает газофазные

25

и поверхностные химические реакции, а также воздействие ультрафиолетовых фотонов, рентгеновского излучения, космических лучей и радиоактивных нуклидов.

1.2.1. Физическая модель диска

Радиальное распределение поверхностной плотности газа в диске $\Sigma(R)$ (г/см²) описывается с помощью стандартного степенного закона с экспоненциальным спадом

$$\Sigma(R) = \Sigma_0 \left(\frac{R}{R_c}\right)^{-\gamma} e^{-(R/R_c)^{2-\gamma}},$$
(1.1)

где Σ_0 — нормировочная константа, γ — показатель степени, зависящий от вязкости в диске, $R_{\rm c}$ — характеристический радиус диска. Значение Σ_0 можно вычислить из полной массы диска $M_{\rm disk}$:

$$\Sigma_0 = \frac{M_{\text{disk}} \left(2 - \gamma\right)}{2\pi R_{\text{c}}^2}.$$
(1.2)

Таким образом, радиальный профиль поверхностной плотности задаётся тремя параметрами: $M_{\rm disk}, \, \gamma, \, R_{\rm c}.$

Предполагается, что диск осесимметричен, а его вертикальная структура определяется гидростатическим равновесием. Если функции P(R, z), $\rho(R, z)$ и T(R, z) описывают двумерные распределения давления, плотности газа и температуры газа, соответственно, то распределение плотности в диске можно получить из следующих уравнений

$$\frac{\partial P\left(R,z\right)}{\partial z} = -\rho\left(R,z\right)\frac{zGM_{\star}}{\left(R^{2}+z^{2}\right)^{3/2}},$$
(1.3)

$$P(R,z) = \frac{k_{\rm B}T(R,z)}{\mu m_{\rm p}} \rho(R,z). \qquad (1.4)$$

Здесь M_{\star} — масса центральной звезды, $k_{\rm B}$ — постоянная Больцмана, G —

гравитационная постоянная. При этом распределение температуры задаётся параметрически через температуру в верхних слоях (атмосфере) диска $T_{\rm a}$ и температуру в (срединной) плоскости диска $T_{\rm m}$ с помощью следующего выражения [40,55]

$$T(R,z) = \begin{cases} T_{\rm a}(R,z_{\rm q}) + (T_{\rm m}(R) - T_{\rm a}(R,z_{\rm q}))\cos^2\left(\frac{\pi z}{2z_{\rm q}(R)}\right) & \text{при } |z| < z_{\rm q}(R), \\ T_{\rm a}(R,z) & \text{при } |z| \geqslant z_{\rm q}(R). \end{cases}$$
(1.5)

Значение z_q определяется как высота над плоскостью диска, на которой T_a достигает максимума при фиксированном R. Выше z_q температура падает, поскольку уменьшается расстояние до звезды; ниже z_q температура падает из-за поглощения. При $z \ge z_q$ в функции источников доминирует нагрев излучением звезды, а при $z < z_q$ — нагрев тепловым излучением пыли в инфракрасном диапазоне.

Температуры в атмосфере и плоскости диска вычисляются из светимости центральной звезды и окружающей её зоны аккреции. В оптически тонкой атмосфере диска температура пыли T_a рассчитывается с помощью моделирования переноса излучения методом трассировки лучей. Тепловое излучение пыли в этой области не вносит значительного вклада в функцию источников, что позволяет рассчитать поле излучения до оптической толщины $\tau_{\rm UV} \sim 10$. Для расчёта переноса излучения в атмосфере диска используется классическое для межзвёздной среды распределение пыли по размерам MRN [64], перенос рассчитывается для звёздного и межзвёздного поля излучения. Спектр центральной звезды описывается излучением абсолютно чёрного тела при заданной температуре поверхности, к нему добавлен дилютированный чернотельный спектр аккреционной области. Спектр реальной звезды может отличаться от чернотельного, однако для целей исследования важным является соотношение между видимой и дальней УФ областью спектра, которое в данном приближении воспроизводится. Предполагается, что масса пыли составляет 0.01 от массы газа. Расчёт теплового баланса пыли в используемой модели протопланетного диска ANDES подробно описан в работе [13].

Температура в плоскости диска $T_{\rm m}$ рассчитывается для оптически толстого случая [56,57]

$$T_{\rm m}^4(R) = \frac{1}{2}\varphi \left[T_{\star}^4 \left(\frac{R_{\star}}{R}\right)^2 + T_{\rm acc}^4 \left(\frac{R_{\rm acc}}{R}\right)^2 \right], \qquad (1.6)$$

где $\varphi = 0.05$ — угол раствора диска [58], а фактор $\frac{1}{2}$ отражает тот факт, что лишь половина ИК излучения, идущего от нагретых верхних слоёв диска, достигает срединной плоскости, в то время как вторая половина излучается наружу. Определённая таким образом температура в плоскости диска отличается от эффективной температуры диска множителем $\sqrt[4]{2}$.

В данной диссертационной работе предполагается, что температуры газа и пыли равны. В плотных участках диска (с концентрацией $\gtrsim 10^6 - 10^8 \,\mathrm{cm^{-3}}$) это предположение выполняется в полной мере. В более разреженной атмосфере диска температура газа может существенно отличаться от температуры пыли. В данной работе это различие не учитывается, поскольку расчёт теплового баланса газа является вычислительно трудоёмкой задачей, в то время как разница температур сказывается на химическом составе лишь в незначительной по массе атмосфере диска. Температура и плотность в диске рассчитываются итеративно, что позволяет получить самосогласованную структуру диска и более точно рассчитать температуру в его верхних слоях. При этом при вычислении $T_{\rm m}$ угол φ фиксируется, чтобы избежать развития неустойчивости и самозатенения диска. Эти эффекты должны быть изучены в рамках отдельной, более подробной модели.

Аккреционная светимость $L_{\rm acc}$ в модели представлена добавлением центрального источника излучения с эффективным радиусом $R_{\rm acc}$ и эффективной температурой $T_{\rm acc}$, так что $L_{\rm acc} = 4\pi R_{\rm acc}^2 \sigma_{\rm SB} T_{\rm acc}^4 = (3/2) GM_{\star}\dot{M}/R_{\star}$, где $\sigma_{\rm SB}$ — постоянная Стефана-Больцмана. Темп аккреции на звезду \dot{M} предполагается равным $10^{-8}M_{\odot}$ /год [59], температура аккреционной области $T_{\rm acc} = 15\,000$ K [60, 61], $R_{\rm acc}$ выбирается так, чтобы оно соответствовало заданной $L_{\rm acc}$. Межзвёздное поле излучения в модели опирается на стандартное описание [62].

Значения параметров звезды R_* , T_* и M_* не являются независимыми. Зная массу M_* и возраст звезды, можно вычислить её радиус R_* и эффективную температуру T_* по эволюционным трекам. В данной работе для этого используется модель ранней эволюции маломассивных звёзд [63] в предположении, что возраст звезды составляет 3 млн лет. Рассматриваются звёзды типа Т Тельца с массой от 0.5 до $1.4 M_{\odot}$. Предполагается, что светимость звезды и аккреционная светимость не меняются в течение химической эволюции диска.

Таким образом, физическая структура диска задаётся четырьмя параметрами: M_{disk} , γ , R_{c} и M_{\star} . Пространственная сетка включает в себя 50 ячеек в радиальном направлении от 1 до 1000 а.е. и 80 ячеек в вертикальном направлении от плоскости диска до z/R = 0.5.

1.2.2. Химическая модель

Химический состав вещества диска рассчитывается с помощью модифицированной версии термо-химического кода ANDES [13], который позволяет решать нестационарную систему уравнений химической кинетики в каждой точке двумерного протопланетного диска, физическая структура которого описана в разделе 1.2.1. Для определения темпов реакций используются коэффициенты скоростей из сетки химических реакций ALCHEMIC [54]. Было проведено сравнение газофазной части сетки химических реакций с результатами расчётов астрохимического кода NAHOON [9], по результатам которого скорректированы некоторые незначительные неточности в сетке. Коэффициенты скоростей некоторых реакций были обновлены в соответствии с астрохимической базой данных KIDA14¹⁾. Итого, применяемая в данной главе химическая модель включает 650 соединений и 7807 реакций. Химия изотопов в ней не рассматривается.

Хотя в исходной версии кода ANDES [13] присутствует модуль расчёта теплового баланса газа и пыли, в данной работе он не используется. Как уже говорилось, температуры газа и пыли задаются параметрически с помощью уравнения (1.5), чтобы избежать вычислительных затрат при моделировании большого набора дисков. Тем не менее, двумерный перенос УФ излучения в атмосфере диска используется для определения значений T_a и расчёта темпов фотореакций.

В качестве дополнительных источников ионизации в модель входят космические лучи, рентгеновское излучение от центрального источника и радиоактивные нуклиды. Темп ионизации рентгеновскими фотонами рассчитывается на основе уравнения (21) из работы [65] при полной УФ светимости $L_{\rm X} = 10^{30}$ эрг/с и энергии фотонов $T_{\rm X} = 3$ кэВ. В отсутствие поглощения темп ионизации космическими лучами принимается равным $\zeta_{\rm CR} = 1.3 \times 10^{-17} \,{\rm c}^{-1}$ [66], фоновый темп ионизации радиоактивными нуклидами $\zeta_{\rm RA} = 6.5 \times 10^{-19} \,{\rm c}^{-1}$ [67]. Характерная поверхностная плотность спада темпа ионизации в *e* раз равна 96 г/см² для космических лучей и 8 г/см² для рентгеновских фотонов [66].

Начальные содержания химических элементов в модели представлены в таблице 1.1. Они соответствуют случаю низкого содержания металлов (low metal из работы [68]). Под содержанием x_i некоторого соединения *i* понимается число частиц, приходящееся на число ядер водорода $n_{\rm <H>} = 2n_{\rm H_2} + n_{\rm H}$: $x_i = n_i/n_{\rm <H>}$. В начале моделирования химический состав идентичен во всех точках диска, все элементы кроме водорода нахо-

¹⁾http://kida.astrophy.u-bordeaux.fr/

	4
Соединение	Содержание
H ₂	0.499
Н	0.002
He	0.09
Ο	$1.76 imes 10^{-4}$
C^+	$7.3 imes 10^{-5}$
N	2.14×10^{-5}
S^+	8×10^{-8}
Si ⁺	8×10^{-9}
Mg^+	7×10^{-9}
Fe^+	3×10^{-9}
Na ⁺	2×10^{-9}
Cl ⁺	1×10^{-9}
P+	2×10^{-10}

Таблица 1.1. Начальный химический состав газа. Содержания соединений нормированы на число ядер водорода $n_{<\mathrm{H}>} = 2n_{\mathrm{H}_2} + n_{\mathrm{H}}$.

дятся в атомарном состоянии, некоторые ионизованы. Начальное содержание молекулярного водорода H₂ равно 0.499, атомарного H — 0.002. Такой начальный состав задаётся для всех моделей, кроме тех, где иное содержание элементов отмечено отдельно (см. раздел 1.5.2).

Помимо газофазных процессов, химическая модель включает в себя аккрецию частиц из газа на пыль (адсорбцию) и сублимацию с поверхности пыли (десорбцию), а также реакции на поверхности пылинок. Поверхностная химия необходима в данной задаче, поскольку в условиях, характерных для протопланетных дисков, многие соединения оседают на поверхность пылинок и становятся сложнонаблюдаемыми. Соотношение между энергией диффузии и энергией десорбции в модели равно 0.5, учитывается туннелирование сквозь барьеры реакций. Считается, что покрывающая пылинку молекулярная мантия — однослойная. В модель включена реактивная десорбция с эффективностью 1%, то есть 99% продуктов поверхностных реакций остаются на поверхности пыли, а 1% выводится в газовую фазу (существуют модели с более подробной трактовкой реактивной десорбции [69]).

При расчёте темпов химических реакций размер пылинок принимается равным 0.1 мкм, как часто делается в астрохимических моделях [48]. В протопланетных дисках пыль эволюционирует, её размер растёт, что при сохранении массы означает уменьшение суммарной площади поверхности частиц и, как следствие, замедление поверхностной химии. Кроме того, при увеличении размера пыли диск становится более прозрачным для излучения. Однако теоретическое описание эволюции пыли в протопланетных дисках представляет собой нетривиальную задачу [70]. В то же время благодаря фрагментации значительная доля пыли остаётся мелкой [71]. В данной работе рост пыли игнорируется, и внимание сосредоточено на разнообразии макроскопических параметров диска.

1.2.3. Набор моделей

В данной работе по аналогии с работой [40] рассматривается набор моделей с различными параметрами, задающими структуру диска. Как показано ранее, структура диска задаётся четырьмя параметрами: масса диска $M_{\rm disk}$, масса звезды M_{\star} , характеристический радиус диска $R_{\rm c}$ и показатель степени в распределении поверхностной плотности γ . Эти параметры варьируются в пределах, характерных для протопланетных дисков вокруг звёзд типа Т Тельца. Принятые значения этих параметров перечислены в таблице 1.2. В отличие от работы [40], температура диска и масса звезды не являются независимыми параметрами, а задаются согласованно.

В разделах 1.3 и 1.5.2 рассмотрены наборы моделей со случайными параметрами, равномерно распределёнными в диапазонах, указанных в таблице 1.2 (для массы диска равномерно распределена величина $\log_{10}(M_{\text{disk}})$). В разделе 1.5.1 рассмотрена сетка моделей с фиксированными

Параметр	Название	Значение
$M_{\rm disk}$	масса диска	$10^{-4}10^{-1}M_{\odot}$
M_{\star}	масса звезды	$0.51.4M_{\odot}$
$R_{\rm c}$	характеристический радиус диска	30200 a.e.
γ	наклон поверхностной плотности	0.51.5

Таблица 1.2. Диапазон параметров моделей.

узлами и представлены проекции пространства параметров. Для каждой из моделей рассчитана химическая эволюция, получены распределения по диску 650 соединений на моменты времени 0.5, 1 и 3 млн лет. Для каждого соединения рассчитана его полная масса в диске.

1.3. Поиск индикаторов массы

Список молекул, детектированных в протопланетных дисках, не слишком обширен из-за их низкой температуры. В него, в частности, входят следующие молекулы: CN, HCN, HNC, CS, SO, H₂CO, C₂H, HC₃N, CH₃CN, C₃H₂, C₂H₂, OH, HCO⁺, N₂H⁺, CH⁺, C⁺, O, NH₃, CH₃OH [72–80]. Потенциальные индикаторы массы, которые могли бы стать альтернативой CO, в первую очередь следует искать среди этих молекул. В то же время с ростом наблюдательных возможностей в протопланетных дисках будут открываться новые молекулы, поэтому в качестве возможных индикаторов массы рассматриваются все соединения, входящие в химическую модель. Так, например, с момента публикации работы [A1], в которой изложены результаты данной главы, в диске вокруг V 883 Ориона были впервые обнаружены несколько сложных органических соединений (H₃COCH₃, CH₃CHO и др. [81]).

Обозначим полное число частиц соединения i в диске как N_i , а полное число ядер водорода, содержащееся во всех соединениях в диске — как $N_{<\rm H>}$. У интересующего нас потенциального индикатора массы его среднее по диску относительное содержание $X_i = N_i/N_{<\rm H>}$ должно слабо зависеть

от параметров диска, а полное число частиц N_i , как и полная масса соединения в диске — хорошо коррелировать с массой диска. Искомая корреляция в общем случае необязательно должна быть линейной, содержание молекулы может быть любой монотонной функцией массы диска. Однако в рамках данной работы внимание сосредоточено именно на линейной зависимости N_i от $N_{\langle H \rangle}$. Также важно, чтобы эта функция не слишком значительно менялась со временем.

Необходимо определить метод количественной оценки пригодности некоторого химического соединения *i* к измерению массы диска. Пусть для каждой *j*-ой модели диска из ансамбля моделей вычисляется логарифм полного содержания этого соединения в диске $x_{ij} = \log_{10} (X_{ij})$. Усреднённая по ансамблю моделей величина $\overline{x_i}$ имеет смысл некоторого типичного логарифма значения содержания *i*-го соединения в протопланетном диске. Дисперсия этой величины $s_i^2 = (\overline{x_{ij} - \overline{x_i}})^2$ будет характеризовать степень пригодности соединения *i* в качестве индикатора массы.

Здесь и далее стандартное отклонение s_i будет обозначаться как «параметр разброса». Его трактовка как характеристики дисперсии содержания молекул в диске имеет ограничения. Во-первых, в реальности распределение дисков по параметрам может отличаться от равномерного распределения, принятого нами при создании ансамбля моделей. Во-вторых, этот параметр ориентирован на линейную зависимость между массой диска и массой вещества *i* в диске и может быть некорректно истолкован, если зависимость между массами нелинейная. С учётом этих ограничений, чем меньше величина s_i , тем больше соединение *i* подходит на роль индикатора массы.

В таблице 1.3 представлены результаты этого простого статистического анализа: полные содержания в диске и параметры разброса на момент времени 3 млн лет для наиболее распространённых соединений, отсортированных по возрастанию *s_i*. В другие моменты времени значение параметра разброса отличается незначительно, слабо увеличиваясь со временем. В таблицу включены соединения, у которых полное содержание в диске превышает 10^{-11} , не показаны льды, H₂ и He. Помимо этого таблица содержит все перечисленные выше соединения, наблюдавшиеся в протопланетных дисках. Молекулы, потенциально наблюдаемые на телескопе имени Джеймса Уэбба (JWST), но ненаблюдаемые на ALMA, обозначены звёздочкой (*). Аналогичная таблица 4.1 для соединений, находящихся в ледяной фазе, представлена в Приложении 1.

> Таблица 1.3: Усреднённое по диску полное содержание отдельных соединений $\overline{X_i} = 10^{\overline{x_i}}$ и их параметр разброса s_i .

Соединение	$\overline{X_i}$	s_i	Соединение	$\overline{X_i}$	s_i
N_2	2.0×10^{-6}	0.25	$\rm H_2 CN^+$	1.6×10^{-11}	0.31
NH ₃	3.2×10^{-9}	0.27	H_2CS	1.6×10^{-11}	0.32
CH_3	3.6×10^{-10}	0.28	NH ₂	3.5×10^{-10}	0.32
СО	8.0×10^{-6}	0.28	SO_2	2.1×10^{-10}	0.32
H_3^+	2.2×10^{-10}	0.28	HNO	1.4×10^{-10}	0.33
$*CO_2$	5.2×10^{-7}	0.28	C_3	1.3×10^{-8}	0.34
H ₂ CO	1.3×10^{-10}	0.29	C_5H_3	2.5×10^{-11}	0.35
H_3O^+	2.6×10^{-10}	0.30	SO	2.7×10^{-9}	0.37
C ₃ H	1.1×10^{-10}	0.39	Si	1.7×10^{-10}	0.46
продолжение следует					

продолжение								
Соединение	$\overline{X_i}$	s_i	Соединение	$\overline{X_i}$	s_i			
OCN	1.7×10^{-10}	0.40	C_4H	1.0×10^{-10}	0.46			
Р	1.5×10^{-11}	0.41	$^{\star}C_{2}H_{2}$	4.3×10^{-10}	0.47			
HC_3O	3.2×10^{-11}	0.41	Na	1.9×10^{-10}	0.48			
H_2S	1.3×10^{-9}	0.41	N_2H^+	1.3×10^{-11}	0.48			
FeH	2.4×10^{-10}	0.42	CS	4.7×10^{-10}	0.49			
*OH	1.4×10^{-8}	0.41	Mg	4.0×10^{-11}	0.49			
C_4	1.6×10^{-10}	0.43	H_2C_3O	4.7×10^{-10}	0.50			
NO	4.1×10^{-9}	0.43	MgH_2	5.2×10^{-10}	0.50			
NH	9.6×10^{-11}	0.43	HS	2.1×10^{-10}	0.51			
S	6.5×10^{-9}	0.43	CH ₂ CO	1.8×10^{-10}	0.51			
SiO	3.4×10^{-10}	0.43	$\rm CH_5N$	2.5×10^{-11}	0.51			
$*O_2$	2.4×10^{-6}	0.44	*H ₂ O	4.0×10^{-7}	0.51			
HNCO	1.9×10^{-9}	0.44	Cl	1.8×10^{-10}	0.51			
C_6	1.5×10^{-11}	0.45	$\rm CH_3CN$	2.0×10^{-11}	0.52			
HCN	2.4×10^{-9}	0.45	HNC	1.2×10^{-9}	0.52			
H_2O_2	4.0×10^{-9}	0.53	CH_3^+	3.8×10^{-11}	0.73			
продолжение следует								
продолжение								
---------------------------	-----------------------	-------	-----------------	-----------------------	-------	--	--	--
Соединение	$\overline{X_i}$	s_i	Соединение	$\overline{X_i}$	s_i			
C_4H_2	2.4×10^{-11}	0.53	C_2H	6.6×10^{-10}	0.74			
C_2H_4	1.7×10^{-11}	0.54	Na ⁺	1.8×10^{-10}	0.74			
C_5	1.1×10^{-10}	0.54	Ν	1.5×10^{-6}	0.75			
C_3H_2	8.7×10^{-11}	0.54	H_5C_3N	2.2×10^{-11}	0.77			
C_5H_2	2.1×10^{-11}	0.55	CH_2	5.6×10^{-10}	0.77			
$^{\star}\mathrm{CH}_{4}$	$7.7 imes 10^{-8}$	0.55	HC_2O	6.9×10^{-11}	0.80			
CH ₃ OH	9.3×10^{-11}	0.56	N_2O	1.2×10^{-10}	0.81			
C_5H	2.2×10^{-11}	0.57	S^+	4.9×10^{-9}	0.81			
$\rm CH_2OH$	4.1×10^{-11}	0.59	HCCN	5.0×10^{-11}	0.81			
$\rm HCO^+$	8.7×10^{-11}	0.60	P+	1.1×10^{-11}	0.82			
НСООН	1.3×10^{-11}	0.63	Si ⁺	5.1×10^{-10}	0.83			
С	4.9×10^{-6}	0.64	СН	1.5×10^{-9}	0.83			
O_3	$5.5 imes 10^{-8}$	0.64	Fe ⁺	1.6×10^{-10}	0.84			
Ο	2.1×10^{-5}	0.66	Mg^+	3.3×10^{-10}	0.84			
C_2H_6	2.3×10^{-9}	0.66	O_2H	1.3×10^{-11}	0.85			
CN	1.4×10^{-9}	0.86	C_2	1.2×10^{-9}	1.02			
продолжение следует								

продолжение								
Соединение	$\overline{X_i}$	s_i	Соединение	$\overline{X_i}$	s_i			
$\mathrm{HC}_3\mathrm{N}$	1.6×10^{-11}	0.86	$\mathrm{CH}_2\mathrm{NH}_2$	4.8×10^{-11}	1.09			
C^+	1.5×10^{-6}	0.88	CH ₃ NH	4.7×10^{-11}	1.09			
C_9H_2	2.3×10^{-11}	0.94	$\rm CH^+$	3.7×10^{-13}	1.19			
C_5H_4	2.9×10^{-11}	0.97	N_2H_2	6.9×10^{-11}	1.22			

В верхней части таблицы 1.3 находятся соединения, содержание которых лучше всего коррелирует с массой диска: N₂, NH₃, CH₃, CO, H₃⁺ и CO₂. На рисунке 1.1. показаны полные массы этих соединений в диске в зависимости от массы диска в ансамбле моделей. На каждом из рисунков сплошной линией показана линейная зависимость, соответствующая среднему содержанию молекулы в диске $\overline{X_i} = 10^{\overline{x_i}}$ из таблицы 1.3. Также для каждой молекулы указан соответствующий параметр разброса.

Наиболее подходящим индикатором массы на основании исключительно значения параметра разброса представляется молекулярный азот N₂. Зависимость его массы в диске от массы диска близка к линейной во всём рассмотренном диапазоне масс. Однако эта молекула, так же, как и H₂, имеет нулевой дипольный момент и поэтому не может легко наблюдаться в дальнем ИК. У N₂ существует изотополог ¹⁴N¹⁵N, который обладает слабым дипольным моментом. Разница между массами ¹⁴N и ¹⁵N очень мала, однако теоретически в дисках могла бы наблюдаться вращательная линия ¹⁴N¹⁵N на длине волны 4.34 мкм.

Полная масса газофазного СО тоже почти линейно зависит от массы диска, однако в области массивных дисков разброс её значений возрастает. Для дисков с более плоским профилем поверхностной плотности (низкие



Рис. 1.1. Полная масса молекулы в диске в зависимости от массы диска в момент 3 млн лет. Показаны молекулы с наименьшим параметром разброса. Размер точки обозначает величину γ , её цвет кодирует характеристический радиус диска R_c . Сплошной линией показана линейная зависимость с коэффициентом, равным средней массовой доле молекулы в дисках (соответствует коэффициентам в таблице 1.3). Штриховой линией показано количество СО в предположении, что в нём находится весь углерод. Параметр разброса для каждой молекулы указан в правом нижнем углу.

значения γ) характерны более низкие содержания CO, а в более компактных дисках (большие γ и малые R_c , т.е. маленькие красные символы на рисунке 1.1) содержание CO, наоборот, выше. Это объясняется тем, что в компактных дисках бо́льшая часть массы находится в тёплой области, и CO в них меньше подвержен вымерзанию на поверхность пылинок. Для протяжённых же дисков существенная доля массы смещается в более холодные области диска, и CO частично уходит из газовой фазы. Более детально преобразование CO рассматривается в разделе 1.4.1.

Штриховая линия на верхней левой панели рисунка 1.1 обозначает максимальную возможную массу газофазного СО в случае, когда все доступные атомы углерода вошли в состав этой молекулы. Этому предельному случаю соответствует $M_{\rm CO} = 1.5 \times 10^{-3} M_{\rm disk}$ (содержание СО по отношению к H₂ равно 1.4×10^{-4} , что выше значения для молекулярных облаков [45]). Полученные результаты показывают, что в рассматриваемых моделях полная масса СО существенно ниже, со средним значением $1.7 \times 10^{-4} M_{\rm disk}$. Большинство атомов углерода находятся не в газофазном СО, а в ледяном СО₂, что обсуждается более подробно в разделах 1.4 и 1.4.1.

Параметр разброса для аммиака NH₃ и метила CH₃ даже немного ниже, чем у CO, однако если посмотреть на рисунок 1.1, видно, что в дисках с массой выше ~ $10^{-3} M_{\odot}$ массы этих молекул сильнее зависят от структуры диска, чем масса CO. У маломассивных дисков зависимость массы NH₃ от массы диска становится заметно нелинейной. Кроме того, содержания NH₃ и CH₃, равно как и H₃⁺, очень низки, что усложняет их наблюдение. Однако отметим, что аммиак всё же был детектирован в диске вокруг TW Гидры с помощью космического телескопа *Herschel* [80]. У симметричных плоских молекул метила и H₃⁺ отсутствуют разрешённые дипольные переходы. Потенциально возможно определить содержание H₃⁺ по излучению его изотополога H₂D⁺, хотя для этого нужно также химическое моделирование с учётом химии изотопов. Однако пронаблюдать в дисках этот ион может быть непросто даже для телескопа ALMA [82].

Также с массой диска хорошо коррелирует масса диоксида углерода $\rm CO_2$, который можно будет наблюдать на JWST. Параметр разброса у этой молекулы сопоставим с таковым у CO. Хотя в области маломассивных дисков зависимость массы $\rm CO_2$ от массы диска нелинейна, это компенсируется одинаково низким разбросом во всём диапазоне масс дисков и линейной зависимостью при $M_{\rm disk}\gtrsim 10^{-3}\,M_\odot$.

В итоге классический индикатор массы в условиях M3C — молекула CO — оказывается наиболее подходящим индикатором массы и для протопланетных дисков. Её легко детектировать, и можно предсказать её содержание в диске с наименьшей неопределённостью. Есть и другие молекулы, параметр разброса которых сопоставим с параметром разброса CO; также есть соединения с высоким значением s_i , но низкой вариативностью в некотором диапазоне параметров диска (см. рисунок 1.2). Например, масса газофазной воды пропорциональна массе диска при $M_{\text{disk}} > 10^{-3} M_{\odot}$, однако её содержание варьируется на два порядка при малых γ : в протяжённых дисках массовая доля воды понижена. Интересно, что согласно наблюдениям обсерватории *Herschel* содержания воды в дисках вокруг DM Тельца [83] и TW Гидры [84] различаются. Возможно, это различие связано не только с возрастом объектов, но и с разной структурой их дисков.

Другие соединения, содержащие углерод (CN, HCO⁺, HCN, H₂CO), также демонстрируют значительный разброс во всём диапазоне масс дисков, причём у массивных дисков разброс больше (рисунок 1.2). Однако в некоторых случаях разброс существенно ниже, если известен размер диска. К примеру, если исключить самые компактные диски, то по уровню вариативности полной массы формальдегид H₂CO сопоставим с CO. Излучение этой молекулы было также зарегистрировано в протопланетных дисках, хотя оно часто демонстрирует кольцевую структуру [85–87], что усложняет



Рис. 1.2. То же, что и рисунок 1.1, для молекул с высоким значением параметра разброса.

интерпретацию этих наблюдений. Для сравнения, CN и HCO⁺ на рисунке 1.2 представляют собой примеры соединений, у которых зависимость от массы диска существенно нелинейна, что затрудняет их использование в качестве индикаторов массы.

Любопытно поведение иона N₂H⁺, содержание которого почти во всём диапазоне масс дисков варьируется слабо. В области маломассивных дисков ($M_{\rm disk} < 3 \times 10^{-4} M_{\odot}$) полная масса N₂H⁺ становится весьма чувствительной к массе диска, однако при более высоких значениях $M_{\rm disk}$ зависимость гораздо слабее. Этот эффект можно объяснить известной связью между содержаниями N₂H⁺ и CO [76]. В самых маломассивных дисках содержание CO в газе уменьшается исключительно за счёт вымерзания. В более массивных дисках к вымерзанию CO добавляется также его превращение в другие молекулы. Резкий рост количества N₂H⁺ в левой части графика отражает постепенное уменьшение содержания газофазного CO вследствие химического разрушения, а более плавный рост в области более массивных дисков свидетельствует о стабилизации и насыщении этого процесса. Вариации содержания N₂H⁺ в массивных дисках связаны со смещением иона из плоскости диска в верхние слои.

1.4. Распределение углерода по молекулам

Содержание в протопланетном диске молекулы CO — наиболее удачного индикатора массы дисков — определяется количеством углерода в элементном составе газа и ледяных мантий. Содержание CO варьируется благодаря различным химическим процессам, вследствие которых углерод перераспределяется между молекулами. В данном разделе рассматриваются основные углеродсодержащие соединения, которые наравне с CO содержат значительную долю имеющихся в среде атомов углерода.

Определим, какие присутствующие в диске соединения содержат наибольшее число атомов углерода. Для этого для каждой из рассмотренных



Рис. 1.3. Усреднённое по ансамблю моделей распределение углерода по основным углеродсодержащим соединениям в моменты времени 0.5, 1 и 3 млн лет. Соединения, находящиеся на поверхности пыли, помечены символом «i». Элементное соотношение С/О равно 0.4.

моделей диска необходимо идентифицировать углеродсодержащие молекулы с самым высоким полным содержанием в диске. Для этих молекул рассчитана доля входящих в них атомов углерода от общего числа атомов углерода в диске. Полученное таким образом распределение углерода по десяти наиболее распространённым углеродсодержащим соединениям показано на рисунке 1.3. Символом «i» помечены ледяные соединения, находящиеся на поверхности пыли.

Видно, что между моментами 0.5, 1 и 3 млн лет распределение углерода меняется незначительно. Это объясняется тем, что к моменту 500 тыс. лет основная масса вещества диска близка к химическому равновесию. Ледяные соединения, показанные на рисунке 1.3, относительно просты, и характерные времена их образования невелики. Однако у отдельных соединений некоторая динамика всё же имеет место. В частности, доля ледяного CO₂ постепенно растёт со временем, а количество CO и в газовой, и в ледяной фазе постепенно уменьшается. Это происходит в основном за счёт превращения iCO в iCO₂ на поверхности пыли. Содержание остальных молекул тоже не остаётся в точности одинаковым, и перераспределение углерода между молекулами в течение рассмотренного промежутка времени пусть и медленно, но продолжается.

Гистограмма на рисунке 1.3 показывает, что на момент 3 млн лет углерод заключён в основном в ледяном CO_2 (27±8%), хотя значительная его доля остаётся в элементной форме в виде нейтрального (C) или ионизованного углерода (C⁺). Среди представленных десяти углеродсодержащих соединений, которые включают в себя 95% всего имеющегося углерода, только четыре находятся в газовой фазе. Помимо C или C⁺ наиболее распространёнными газофазными соединениями являются CO, включающий в себя 13% атомов углерода, и CO₂, в который входит всего около 1% углерода. Можно сказать, что лишь каждый седьмой атом углерода принадлежит газофазному CO. Преобладание льда CO₂, который образуется в основном на поверхности пыли, подчёркивает необходимость учёта в модели химических реакций на поверхности пылинок.

1.4.1. Химическое разрушение СО

На рисунке 1.4 представлены распределения основных углеродсодержащих соединений по диску. Выбрана одна из моделей с типичными параметрами: $M_{\rm disk} = 0.01 \ M_{\odot}, \ M_{\star} = 1.0 \ M_{\odot}, \ R_{\rm c} = 100 \, {\rm a.e.}$ и $\gamma = 0.8$. Показанные молекулы могут находиться как в газовой, так и в ледяной фазе в зависимости от локальных условий, их газофазные и ледяные компоненты изображены на рисунке 1.4.

Для описания распределения молекул по диску часто используют понятие «линии льдов» — границы, отделяющей область диска, где молекула находится в основном в газовой фазе, от области диска, где она переходит в ледяную фазу. Это понятие учитывает лишь адсорбцию и десорбцию молекулы, в то время как на содержание молекулы в фазе могут влиять и



Рис. 1.4. Распределение по диску основных углеродсодержащих соединений в момент времени 3 млн лет в одной из рассмотренных моделей $(M_{\rm disk} = 0.01 \, M_{\odot}, \, M_{\star} = 1.0 \, M_{\odot}, \, R_{\rm c} = 100 \, {\rm a.e.}$ и $\gamma = 0.8$). В верхней половине каждого графика показано содержание молекулы в газовой фазе, в нижней — в ледяной. Содержание нормировано на общее число ядер водорода. Чёрными линиями обозначены изолинии температуры, серая линия очерчивает зону, не затронутую фотодиссоциацией.

другие химические реакции в газе и на поверхности пыли. Линия льдов определённой молекулы характеризуется её температурой замерзания, при которой содержания в газовой и ледяной фазе равны.

На рисунке 1.4 линия льдов CO_2 хорошо видна на расстоянии около 6 а.е. от звезды: большая часть ледяного CO_2 (iCO₂) находится в затенённых областях диска на расстояниях до 300 а.е. Линия льдов ещё одного распространённого льда, метана CH_4 , находится на расстоянии около 20– 30 а.е. от звезды, iCH₄ имеет высокое содержание в плоскости диска от 30 до 300 а.е. Область, где много замороженного этана iC₂H₆, простирается вплоть до нескольких астрономических единиц от звезды, а в газовой фазе этой молекулы почти нет. Среди наиболее распространённых в диске углеродсодержащих соединений только CO находится в основном в газовой, а не в ледяной фазе.

Для молекулы CO стандартным значением температуры замерзания считается величина $T_{\rm CO} \approx 20$ K [88]. В модели с $M_{\star} = 1.0 M_{\odot}$ это соответствует расстоянию 70 а.е. от звезды в плоскости диска. Однако на рисунке 1.4 видно, что уже за пределами 15 а.е. содержание CO в газе уменьшается на несколько порядков. Это свидетельствует о том, что помимо десорбции на него влияют также другие химические процессы, уменьшающие содержание и газофазного, и ледяного CO.

Химическое разрушение СО в этой области диска можно описать с помощью следующего механизма. Даже внутри линии льдов СО, где температура превышает 20 К, происходит постоянный обмен молекулами СО между газовой и ледяной фазами. Временно оказавшиеся на поверхности пыли молекулы iCO успевают прореагировать с iO или iOH и превратиться в iCO₂, который при этих температурах не переходит в газовую фазу и остаётся на поверхности пылинок. Такая схема разрушения CO описывалась также другими авторами [89–91].

Полезным представляется сравнить полученное в модели распреде-

ление СО с его качественным описанием, не учитывающим химические процессы помимо фотодиссоциации и замерзания [40]. На рисунке 1.4 чёрными и серыми контурами обозначена область, ограниченная параметрическими критериями [40]. Предполагается, что СО находится в газовой фазе и имеет относительное содержание 10^{-4} везде, кроме областей, где он замерзает (T < 20 K) или фотодиссоциирует. Фотодиссоциации СО помимо самоэкранирования препятствует эффект экранирования молекулярным водородом, который поглощает УФ фотоны, способные диссоциировать СО [92]. Поэтому считалось, что фотодиссоциация СО происходит только в том случае, если лучевая концентрация H₂ над заданной точкой мала, $\Sigma_{\rm H_2} < 1.3 \times 10^{21}$ см⁻². Это условие, принятое в работе [40], основано на теоретических [92] и наблюдательных [46] данных.

Внутри ограниченной таким образом части диска содержание молекулы CO, полученное с помощью астрохимической модели, неоднородно. Во внутренних областях диска оно составляет около 5×10^{-5} по отношению к числу ядер водорода, а за пределами 20 а.е. заметно понижено за счёт химической переработки в другие молекулы. Кроме того, во внешних областях диска CO присутствует там, где он предположительно должен быть фотодиссоциациирован. В представленной модели эта область экранирована диском от звёздного ультрафиолета; межзвёздного же ультрафиолета хватает на то, чтобы фотодесорбировать CO с поверхности пылинок, но (благодаря экранированию H₂) недостаточно, чтобы фотодиссоциировать произведённый таким образом CO. За счёт этого, несмотря на низкие температуры (T < 20 K), содержание CO в газе довольно высокое (> 10^{-5} к числу ядер водорода). Однако благодаря низкой плотности вещества в этой части диска вклад добавочного CO в его полное содержание в диске незначителен.

В рассмотренном ансамбле моделей среднее соотношение между содержаниями льдов iCO₂ и iH₂O равно 1/3. В модели, представленной на рисунке 1.4, отношение содержаний iCO_2/iH_2O меняется от 10% до 110% между 6 и 120 а.е., достигая максимума на 20 а.е. Лёд CO преобладает надо льдом CO₂ за пределами 200 а.е., максимальное отношение их содержаний iCO/iH_2O достигается на 300 а.е. и равно 0.6. Эти характерные относительные содержания по порядку величины согласуются с наблюдаемыми в кометах Солнечной системы [93]. Однако при сравнении этих результатов с составом комет необходимо помнить, что наблюдаемые в кометах содержания летучих соединений определяются в том числе структурой кометных ядер и их тепловой эволюцией [94], а также химическими реакциями в комах комет. Динамическая эволюция кометного ансамбля также может оказать влияние на содержание летучих соединений. Представленные соотношения между содержаниями льдов получены путём усреднения большого числа различных моделей, и могут варьироваться в зависимости от конкретной модели и от рассматриваемой области диска.

В модели, показанной на рисунке 1.4, область диска, ограниченная вышеобозначенными критериями [40], содержит 56% массы диска. Для других моделей из рассмотренного набора эта доля варьируется от 5% в самых маломассивных дисках, прозрачных для ультрафиолета, до 94% в тёплых компактных дисках. В среднем ограниченная этими критериями область содержит около 50% массы диска. Если предположить, что содержание CO в газе (по отношению к H₂) составляет 10^{-4} , как в молекулярных облаках, то среднее по диску содержание CO составит $\approx 5 \times 10^{-5}$. Согласно представленным в данной работе результатам моделирования, среднее полное содержание газофазного CO в диске (нормированное на число ядер водорода) составляет $\overline{X_{CO}} = 8 \times 10^{-6}$ (см. таблицу 1.3). На основании этих вычислений для определения массы дисков из наблюдений следует использовать значение относительного содержания CO/H₂, равное 1.6×10^{-5} . Использование для оценки доли CO качественных критериев вместо химического моделирования приводит к переоценке содержания CO в диске в среднем в три раза.

Также можно модифицировать температурный критерий из работы [40]: заменить в нём температуру замерзания СО на другое характерное значение температуры, при котором молекула исчезает из газовой фазы. Как видно на рисунке 1.4, в тех областях, где СО присутствует в газе, его содержание действительно составляет около 10^{-4} (по отношению к H₂). Эту область можно качественно описать изолинией $T \approx 40$ K, очерчивающей область химического разрушения СО, вместо температуры вымерзания 20 К. Второй критерий, описывающий фотодиссоциацию, упускает из рассмотрения дополнительный СО во внешнем диске, однако эта область даёт лишь небольшой (порядка нескольких процентов) вклад в общую массу диска, поэтому существенной модификации критерия не требуется.

1.5. Влияние параметров модели на содержание молекул

1.5.1. Структура диска

В предыдущих разделах рассматривались модели с параметрами, выбранными случайно в заданных интервалах значений. В данном разделе рассмотрим набор моделей на сетке параметров с фиксированными узлами. Такой подход позволяет выявить влияние отдельных параметров на содержание СО в диске: зафиксировать некоторые из величин и проследить изменение результатов в зависимости от оставшихся переменными параметров.

На рисунке 1.5 проиллюстрировано влияние характеристического радиуса диска R_c и массы центральной звезды M_{\star} на вариации среднего по диску содержания газофазного СО при фиксированном значении индекса поверхностной плотности $\gamma = 0.5$. В компактных дисках ($R_c = 30$ a.e.) масса звезды влияет на содержание СО незначительно. В них изменению массы звезды от 0.5 до 1.4 M_{\odot} соответствует примерно трёхкратное различие в



Рис. 1.5. Среднее по диску содержание СО в моделях с разным характеристическим радиусом диска $R_{\rm c}$ вокруг звёзд различной массы. Момент времени 3 млн лет, $\gamma = 0.5$. Цветом показано значение $R_{\rm c}$. Сплошные, штриховые и пунктирные линии соответствуют разным массам звезды. Максимально возможное значение $X_{\rm CO}$ обозначено серой линией.

содержании CO, причём содержание CO растёт с массой звезды. В дисках большего радиуса влияние массы центральной звезды более существенно, в особенности для маломассивных дисков ($M_{\rm disk} \lesssim 10^{-3} M_{\odot}$). Для них такое же различие в M_{\star} соответствует на порядок различающимся $X_{\rm CO}$. Если учесть все варьируемые параметры, неопределённость в содержании CO в маломассивных дисках достигает двух порядков величины.

Интересно отметить, что в моделях с маломассивным диском содержание СО в основном тем выше, чем горячее (массивнее) звезда, а в моделях с массивным диском зависимость противоположная. На содержание СО влияют и фотодиссоциация, и фотодесорбция; в зависимости от структуры диска увеличение температуры звезды (и как следствие УФ поля излучения) может приводить как к росту, так и к уменьшению содержания СО в газе. Маломассивные диски наиболее прозрачны для УФ излучения звезды, в них газофазный СО эффективно фотодиссоциирует при увеличении массы звезды и его среднее содержание уменьшается. Самые компактные маломассивные диски с $R_c = 30$ а.е. являются тут исключением, поскольку в них вся масса заключена в меньшем объёме, что ведёт к повышению поверхностной плотности и уменьшению роли фотодиссоциации. В более массивных дисках доминирующим механизмом разрушения СО является не фотодиссоциация, а химическое разрушение — в основном превращение в iCO₂, описанное в разделе 1.4.1. В таком случае, чем меньше масса звезды, тем диск холоднее, а значит больше зона, в которой СО эффективно перерабатывается в другие молекулы.

При других значениях γ (0.8, 1.0 и 1.5) вариации в содержании СО не столь велики: чем выше γ , тем меньше разброс значений. Описанные различия в содержании СО наиболее выражены при значении $\gamma = 0.5$, которое соответствует плавному спаду поверхностной плотности. В этом случае больше вещества оказывается во внешних областях диска, где более эффективно химическое разрушение и вымерзание СО. Зависимость содержания СО от R_c имеет сходную природу: при равной массе диска модели с низким R_c содержат больше вещества во внутренних тёплых областях, и больше СО остаётся в газовой фазе.

Таким образом, при фиксированном значении радиуса и/или массы диска содержание газофазного СО в диске варьируется с массой диска не слишком существенно, в особенности при низких значениях характеристического радиуса. Для дисков с заранее известной массой центральной звезды или оценкой радиуса диска неопределённость в содержании СО значительно ниже, чем на полном ансамбле моделей.

1.5.2. Начальное соотношение С/О

Распределение углерода по разным молекулам, описанное в разделе 1.4, было получено в модели с элементным соотношением углерода к кислороду C/O≈0.4 при начальных содержаниях, представленных в таб-



Рис. 1.6. То же, что и на рисунке 1.3, но для C/O=2.

лице 1.1. Чтобы оценить влияние элементного соотношения C/O на содержания химических соединений, был рассмотрен дополнительный набор моделей, в котором начальное содержание кислорода было уменьшено с 1.76×10^{-4} до 3.65×10^{-5} (C/O= 2).

На рисунке 1.6 показана доля атомов углерода, заключённых в различных соединениях, которые являются основными углеродсодержащими соединениями в моделях с C/O=0.4. По сравнению с аналогичным рисунком 1.3 газофазное содержание CO_2 и CO заметно понижено, что обусловлено недостатком кислорода в модели. Представленные соединения включают $\approx 85\%$ всего углерода, в отличие от 95% при C/O=0.4. В среднем лишь 7% атомов углерода находятся в газофазном CO, причём количество льда CO практически не изменилось.

Вместо ледяного CO_2 в этом наборе моделей на поверхности пыли активно формируются другие углеродсодержащие соединения. Кроме iCH₄, iC₂H₆ и iC₃H₄, показанных на рисунке 1.6, результаты моделирования демонстрируют повышение содержания таких поверхностных молекул как iC_5H_2 , iCH_3CN , iC_9H_2 , iCH_3C_3N , а также многих других соединений, содержащих длинные углеродные цепочки [95]. Содержание атомарного и ионизованного углерода также выше, чем в случае C/O = 0.4. В целом, изменение начального элементного состава оказывает существенное влияние на содержание CO и на химический состав диска.

Для представленного здесь набора моделей также были рассчитаны значения параметра разброса s_i . У газофазного СО значение параметра разброса по-прежнему одно из самых низких — 0.22 порядка. Его ненамного опережают N₂ с $s_{N_2} = 0.20$, а также несколько соединений со сравнимым параметром разброса, но низким средним содержанием (< 10^{-9}). В данном наборе моделей содержание газофазного CO₂, который демонстрировал низкий разброс при C/O= 0.4, имеет параметр разброса $s_{CO_2} = 0.60$, что не способствует его пригодности для определения массы диска. Среди соединений, содержание которых хорошо коррелирует с массой диска, только у CO и N₂ значения параметра разброса остаются низкими при C/O= 2.

1.6. Обсуждение результатов

Рассмотренный в данной главе набор параметров покрывает широкий диапазон возможных профилей поверхностной плотности протопланетных дисков вокруг звёзд типа Т Тельца. Результаты моделирования показывают, что молекула СО является наиболее перспективным индикатором массы и превосходит все остальные рассмотренные молекулы, поскольку её среднее содержание в диске имеет минимальные неопределённости на данном наборе моделей. Некоторые другие молекулы, например, H₂O, H₂CO и в особенности CO₂, также имеют хорошую корреляцию с массой диска, в частности, если имеется информация о структуре диска.

Сочетание низкой неопределённости химического состава, удобства наблюдения и высокого содержания в диске позволяет выделить молекулу

СО как наиболее подходящий индикатор массы протопланетного диска. В данной главе показано, что её среднее содержание в диске мало меняется в зависимости от параметров диска. Однако оно оказывается равным $\overline{X_{\rm CO}} = 8 \times 10^{-6}$, то есть в несколько раз ниже, чем стандартное для межзвёздной среды 5×10^{-5} (10^{-4} по отношению к H₂). Помимо вымерзания на поверхность пыли и фотодиссоциации УФ излучением, которые в среднем уменьшают содержание СО вдвое, оно понижается ещё на фактор ~3 вследствие разрушения в химических процессах на поверхности пылинок.

При определении массы дисков по СО часто используют упрощённое описание его химии [40]. Однако возникающие несоответствия между массами дисков, определёнными разными способами [35, 36, 89], заставляют предположить влияние на содержание СО дополнительных факторов, таких как эволюция пыли, рассеяние газового диска, химическое разрушение, недостаток углерода или химия изотопов. В данной работе показано, что одно только химическое разрушение может приводить к занижению масс дисков в среднем в три раза.

Упрощённый метод учёта разрушения СО [40] можно модифицировать так, чтобы с помощью простой параметризации учесть химическое разрушение СО. Во-первых, можно предполагать более низкое значение среднего содержания СО в диске $(1.6 \times 10^{-5}$ при нормировке на H₂), но оставить неизменными критерии разрушения при фотодиссоциации и вымерзании. Во-вторых, в качестве альтернативы можно оставить неизменными условия для фотодиссоциации и среднего содержания, но модифицировать температурный критерий: принимать в качестве температуры разрушения СО T = 40 K.

В рамках детального физико-химического моделирования протопланетного диска применимость CO как индикатора массы была исследована и рядом других авторов. В работах [41,50,96] рассматривались изотопологи ¹³CO, C¹⁷O и C¹⁸O, их излучение применялось для определения масс дисков. Полученные таким образом массы дисков оказались очень низкими (в некоторых случаях меньше массы Юпитера). Авторы объясняют низкие значения массы возможным влиянием поверхностной химии: существенным фракционированием изотопов при крупном размере пыли [96] или наличием неучтённых в модели химических процессов на поверхности пыли, участвующих в преобразовании СО [50].

Астрохимическое моделирование показывает, что СО в дисках действительно может превращаться в другие молекулы на поверхности пыли [89–91]. Моделирование с учётом химии изотопов и поверхностной химии также предсказывает эффективное превращение СО в менее летучие молекулы [51,53], что при недостаточно детальном рассмотрении химии может приводить к недооценке массы дисков в несколько раз. Перечисленные исследования, однако, концентрировались в основном на химии изотопов и применении соотношения между излучением в линиях изотопологов СО в качестве индикатора массы. В данной работе химия молекулы СО рассматривается без учёта изотопологов, но на широком ансамбле моделей протопланетных дисков с различными параметрами. Кроме того, проводится систематический поиск потенциальных альтернативных индикаторов массы — соединений, концентрация которых в диске коррелирует с его массой. Результаты данной диссертационной работы хорошо согласуются с выводами других авторов.

Следует указать ограничения представленной в данной работе модели. Принятое распределение протопланетных дисков по параметрам может отличаться от реального. Наблюдательные проявления молекул, не рассмотренные в данной работе, могут накладывать свои ограничения на их применимость для определения массы дисков. В работе не рассмотрен такой перспективный индикатор массы дисков, как молекула HD. Также рассматривается стандартное распределение пылевых частиц по размерам MRN [64], однако при существенной эволюции пыли её размер может оказать влияние на химический состав диска.

Данное исследование можно продолжить и рассмотреть зависимость содержания молекул от размера пыли. В протопланетных дисках происходит активная эволюция пыли, средний размер частиц растёт, что может оказывать влияние на химический состав вещества. Например, рост пыли на ранних стадиях способствует сдвигу молекулярного слоя ближе к плоскости диска, где плотность газа и пыли выше [13]. Для индикаторов массы такой сдвиг может означать большую стабильность содержания и уменьшение неопределённостей.

1.7. Положение, выносимое на защиту

По результатам первой главы на защиту выносится следующее положение:

Показано, что молекула СО является наиболее адекватным молекулярным индикатором массы протопланетных дисков. Показано, что средняя концентрация СО в дисках составляет 1.6 × 10⁻⁵ по отношению к H₂, что на порядок ниже, чем в молекулярных облаках. Показано, что при определении масс дисков по СО пренебрежение химическим разрушением СО может приводить к в среднем трёхкратной недооценке массы дисков.

Глава 2. Влияние вспышек светимости звёзд типа FU Ориона на химический состав протопланетных дисков

Вспышки светимости различной амплитуды наблюдаются у многих молодых звёздных объектов. Из-за роста светимости центрального источника меняется структура окружающего молодую звезду протопланетного диска, в первую очередь его температура. Резкое изменение физических условий не может не отразиться на химическом составе вещества диска.

Чтобы описать особенности химического состава протопланетного диска, испытывающего вспышку, необходимо теоретическое моделирование. Нестационарность химических процессов может приводить к появлению или исчезновению характерных соединений; химический состав меняется не мгновенно и может сохранять отпечаток вспышки даже после её окончания. Выделение особенностей химического состава протопланетных дисков, испытавших в прошлом влияние вспышки фуора, необходимо, чтобы идентифицировать такие объекты в наблюдениях.

В данной главе исследуется, как эволюционирует химический состав диска вокруг фуора под действием вспышки светимости. С помощью астрохимического моделирования анализируется, как вспышка светимости влияет на химический состав вещества, и как быстро он возвращается к исходному (довспышечному) после её окончания. Также исследуется пространство параметров диска и идентифицируются соединения, содержание которых наиболее чувствительно к вспышке светимости, в особенности соединения, сохраняющиеся в диске на больших временных масштабах.

В разделе 2.1 приводится обзор наблюдательных проявлений фуоров

и сопутствующих изменений в свойствах протопланетных дисков. Особенности применяемой модели описаны в разделе 2.2. Далее проводится сравнение с результатами предыдущих работ (разделы 2.3 и 2.4), выделяются наиболее чувствительные к вспышке соединения, рассматриваются их распределения по диску (раздел 2.5). Основные результаты опубликованы в статье [A2].

2.1. Вспышки аккреции у молодых звёздных объектов

В теории образования маломассивных звёзд существует так называемая проблема светимости: наблюдаемые светимости молодых звёздных объектов (M3O) на порядок ниже, чем теоретические значения. Одним из возможных объяснений этого несоответствия является сценарий эпизодической аккреции, в котором темп аккреции на звезду, а вместе с ним и аккреционная светимость M3O, варьируется на несколько порядков [18,97]: в промежутках между короткими и яркими вспышками объект продолжительное время находится в состоянии низкой светимости.

Подобное поведение характерно для фуоров — молодых звёздных объектов типа FU Ориона, у которых наблюдаются вспышки светимости с амплитудой ~ 100 L_{\odot} , длящиеся десятки лет [16, 20]. Фуорами могут быть как молодые звёздные объекты класса I, окружённые плотной газопылевой оболочкой, так и объекты, относящиеся скорее к классу II, у которых оболочка почти рассеялась [98]. Более короткие (порядка нескольких лет) и менее яркие (~ 10 L_{\odot}) вспышки светимости наблюдаются у объектов типа EX Волка — экзоров. Обычно экзоры находятся на более поздней стадии эволюции и принадлежат к классу II. Несмотря на то, что фуоры и экзоры отличаются характером вспышек, границу между этими двумя типами объектов не всегда удаётся чётко обозначить [16].

В настоящее время обнаружено всего около нескольких десятков экзоров и фуоров [16,99]. Многие МЗО, у которых не наблюдается признаков вспышечной активности, могут быть фуорами или экзорами на стадии спокойной аккреции. Поскольку промежутки между вспышками в теоретическом сценарии эпизодической аккреции исчисляются сотнями и тысячами лет, вспышки многих таких объектов могли произойти до эпохи высокоточной фотометрии и остаться незафиксированными в наблюдениях. Поэтому необходимы альтернативные способы идентификации M3O, испытывавших вспышки светимости, и определения давности этих вспышек.

В этой ситуации на помощь приходит химия: вспышки светимости существенно влияют на физическую структуру диска и оставляют след в его химическом составе [15, 17, 100–102]. Так, например, влияние вспышки фуора на химический состав диска с окружающей оболочкой и на излучение содержащейся в нём молекулы CO было рассмотрено в работе [102]. Наблюдательные признаки недавней вспышки светимости были обнаружены у объекта IRAS 15398–3359, принадлежащего к классу 0 [103]. На это указывает отсутствие эмиссии HCO⁺ в направлении на центр объекта: предполагается, что это соединение было разрушено в реакциях с газофазной водой, десорбированной с поверхности пыли во время вспышки светимости. Кроме наиболее очевидного процесса сублимации ледяных соединений вследствие нагрева вещества диска, вспышки светимости могут активировать альтернативные цепочки химических реакций, такие как реакции с барьерами или реакции на поверхности пылинок.

Для идентификации недавних вспышек светимости у экзоров также может быть полезна минералогия. Авторы исследования [104] наблюдали кристаллизацию аморфных силикатных пылинок во внутреннем диске вокруг звезды ЕХ Волка под действием яркой вспышки 2008 года. Последующие наблюдения показали, что новообразованные кристаллические силикаты постепенно исчезают [105]. Можно заключить, что заметное повышение доли кристаллических силикатов в протопланетном диске может быть признаком недавней вспышки.

Наиболее чувствительно реагируют на изменение тепловой структуры диска летучие соединения: вода, монооксид углерода, диоксид углерода и др. [15,93,106,107]. Когда во время вспышки диск нагревается, льды почти мгновенно переходят в газовую фазу, из-за чего линии льдов соответствующих соединений будут находиться от звезды дальше, чем в спокойном диске. Например, в диске вокруг фуора V 883 Ориона наблюдается резкое падение оптической толщины на расстоянии 40 а.е. от звезды [108]. Авторы объясняют это тем, что именно на таком расстоянии находится линия льдов воды вследствие нагрева текущей вспышкой светимости. Однако необходимо отметить, что данное объяснение подвергается критике [109]. После окончания вспышки летучие соединения могут возвращаться на поверхность пыли далеко не мгновенно. Сдвиг линии льдов СО, наблюдающийся в МЗО с низкой светимостью (VeLLOs), также может быть следствием недавних вспышек светимости [110].

Вспышки светимости могут также повлиять на свойства пыли, что позволяет косвенно идентифицировать их по наблюдениям в пылевом континууме. Помимо вышеупомянутой кристаллизации силикатов вспышки могут приводить к сублимации ледяных мантий пылинок, что меняет столкновительные свойства пылинок, делает их более хрупкими и таким образом ограничивает рост пыли [108,111,112]. Кроме того, если пыль росла за счёт образования агрегатов из мелких пылинок, слипшихся ледяными мантиями, то вспышка светимости может привести к распаду агрегатов на отдельные мономеры и резкому падению среднего размера пылевых частиц внутри линии льдов воды, сдвинутой вспышкой [108].

В данной главе рассматриваются протопланетные диски без окружающей оболочки, что соответствует фуорам, относящимся к МЗО класса II. Исследуется изменение химического состава вещества в результате воздействия одиночной вспышки фуора в рамках нескольких моделей диска, отличающихся массой и характеристическим радиусом диска, а также типичным размером пыли. Целью работы является систематический анализ и выделение молекул, наиболее чувствительных к вспышке. Особое внимание уделяется соединениям, содержание которых остаётся нетипичным продолжительное время после окончания вспышки, что позволит рассматривать их как потенциальные индикаторы прошлой вспышечной активности МЗО. Проводится анализ химических процессов, индуцированных вспышкой светимости.

2.2. Модель диска со вспышкой

Для моделирования химической эволюции протопланетного диска вокруг звезды, испытывающей вспышку светимости, используется астрохимический код ANDES [13]. Конфигурация модели, принятая для данной задачи, близка к описанной в разделах 1.2.1 и 1.2.2. Модификации модели для описания диска вспыхивающего фуора изложены ниже.

2.2.1. Модель вспышки

Основной особенностью модели, применяемой в данной главе, является введение переменной аккреционной светимости, призванное описать вспышку фуора. Рассматривается диск, испытывающий вспышку светимости, которая предваряется фазой спокойного режима аккреции. После окончания вспышки снова наступает продолжительный промежуток спокойной аккреции.

В течение всего рассматриваемого времени светимость центральной звезды постоянна и составляет $0.9 L_{\odot}$, что характерно для молодой солнцеподобной звезды. Во время спокойной фазы аккреционная светимость равна $0.3 L_{\odot}$ при темпе аккреции $10^{-8} M_{\odot}$ /год. На рисунке 2.1 показан заложенный в модель профиль светимости. Во время вспышки аккреци-



Рис. 2.1. Аккреционная светимость во время вспышки. Начальный момент времени t = 0 соответствует последнему моменту спокойной фазы, предшествующей вспышке. Точки 1–3 обозначают моменты времени t = 0 (точка 1), 51 (точка 2) и 71 (точка 3) год после начала вспышки, соответственно.

онная светимость возрастает до $200 L_{\odot}$, что соответствует темпу аккреции на звезду ~ $10^{-5} M_{\odot}$ /год. В течение одного года светимость линейно возрастает, затем на протяжении 50 лет остаётся постоянно высокой, а после этого за 20 лет снова линейно спадает до начального значения. Химическая эволюция спокойного диска рассчитывается до момента 500 тыс. лет, затем 71 год во время вспышки и ещё 10 тыс. лет после её окончания.

2.2.2. Особенности физической и химической моделей

Физическая структура диска меняется вслед за изменением аккреционной светимости. На каждом временном шаге распределения температуры, плотности, УФ поля излучения пересчитывается с учётом текущего значения аккреционной светимости. Предполагается, что при изменении физической структуры неизменными остаются относительные содержания химических соединений в каждой ячейке, то есть их абсолютные концентрации могут поменяться. Такое предположение может привести к несохранению элементов при недостаточно медленном изменении светимости, однако в нашей модели эффект такого несохранения незначителен.



Рис. 2.2. Пример распределения температуры (показана изолиниями) и плотности (показана цветом) в диске при разных значениях аккреционной светимости. Светимость звезды постоянна и равна $0.9L_{\odot}$. Аккреционная светимость различна на каждом из рисунков: $L_{\rm acc} = 0.3L_{\odot}$ (спокойная аккреция, левый рисунок), $L_{\rm acc} = 20L_{\odot}$ (во время роста светимости, средний рисунок), $L_{\rm acc} = 200L_{\odot}$ (максимальная светимость во время вспышки, правый рисунок). Показаны изолинии температуры, соответствующие типичным для диска температурам вымерзания основных летучих соединений: 25 К у СО, 70 К у СО₂ и 160 К у H₂O, соответственно [88].

Примеры физической структуры диска при разных значениях аккреционной светимости показаны на рисунке 2.2. Левый рисунок соответствует стадии спокойной аккреции, когда $L_{tot} = L_{star} + L_{acc} = 0.9 + 0.3 L_{\odot}$ (моменты 1 и 3 на рисунке 2.1). На среднем рисунке показан один из моментов на стадии роста светимости, при $L_{tot} = 0.9 + 20 L_{\odot}$. Правый рисунок соответствует максимуму аккреции, когда $L_{tot} = L_{star} + L_{acc} = 0.9 + 200 L_{\odot}$ (момент 2 на рисунке 2.1). На рисунке 2.1 видно, как с ростом аккреционной светимости диск нагревается и утолщается. При максимальной светимости 200 L_{\odot} температура в плоскости диска превышает 50 K даже на расстоянии 100 а.е. от звезды.

Важно отметить, что в модели предполагается квази-стационарность диска. В реальности за время типичной для фуоров вспышки (~ 100 лет) не все области диска успеют адаптироваться к возросшей аккреционной светимости и достичь равновесного состояния. Характерные тепловые и динамические времена в диске могут превышать принятую продолжительность вспышки (см., например, уравнения (24–30) в работе [56] или рисунок 3 в работе [113]). В рамках данной модели предполагается, что равновесие достигается мгновенно.

В настоящее время остаётся неясным, как меняется рентгеновское излучение фуоров во время вспышки. У некоторых фуоров оно наблюдается, у некоторых — нет [114–116]. В то же время рентгеновские вспышки происходят и у объектов, не являющихся фуорами, например, у V1647 Ориона [117–119]. В данной работе предполагается, что рентгеновская светимость центрального источника составляет 10³⁰ эрг с⁻¹ и на спокойной стадии, и во время вспышки. Это предположение подтверждается наблюдениями переменных МЗО [120–123]. Как и в предыдущей главе, ультрафиолетовая светимость представлена в виде чернотельного спектра. Температура аккреционной области принимается равной 20 000 K, её эффективный размер варьируется для достижения заданного значения аккреционной светимости.

В химическую модель, описанную в разделе 1.2.2, также были внесены некоторые модификации. Для данной задачи использовались молекулярные начальные содержания химических соединений. Заданный начальный состав газа (включая ледяные мантии на пылинках) соответствует предрассчитанному составу молекулярного облака возрастом 1 млн лет. При расчёте состава облака предполагалось, что концентрация газа в нём составляет 10⁴ см⁻³, температура 10 К, УФ излучение отсутствует, средний размер пылевых частиц составляет 0.1 мкм, а начальные содержания соответствуют случаю низкого содержания металлов (low metal из работы [68]). Рассчитанный состав облака включает различные сложные соединения в газе и на поверхности пылинок. В процессе образования протопланетного диска из протозвёздного ядра химический состав вещества претерпевает значительные изменения [124–126]. В рамках квази-стационарной модели учёт этой эволюции не представляется возможным, поэтому предполагается, что в начале моделирования состав диска соответствует составу молекулярного облака.

Также был изменён подход к описанию размера пылевых частиц в химической модели. Для расчёта переноса излучения и тепловой структуры диска предполагается, что пылинки имеют степенное распределение по размерам f(a), подобное описанному классической для M3C моделью MRN [64]. В данной главе используется аналогичное распределение, у которого максимальный размер пылинок увеличен по сравнению со стандартным $a_{\rm max} = 2.5 \times 10^{-5}$ см [64]. Для химического моделирования значение имеет суммарная по ансамблю площадь пылинок в единице объёма, которая вычисляется из заданного распределения.

Рассмотрим два варианта распределения пылинок по размерам: «средняя пыль» с максимальным размером $a_{\text{max}} = 2.5 \times 10^{-3}$ см и «крупная пыль» с максимальным размером $a_{\text{max}} = 2.5 \times 10^{-1}$ см. Минимальный размер пылинок $a_{\text{min}} = 5 \times 10^{-7}$ см в обоих вариантах. В каждой точке протопланетного диска распределение пыли по размерам одинаково, т.е. оседание пыли к плоскости диска и радиальный дрейф не учитываются. Средний размер пылинок для химической модели рассчитывается по следующей формуле [127]

$$\overline{a} = \int_{a_{\min}}^{a_{\max}} f(a) a^3 da / \int_{a_{\min}}^{a_{\max}} f(a) a^2 da , \qquad (2.1)$$

которая для средней и крупной пыли даёт, соответственно, $\bar{a} = 3.7 \times 10^{-5}$ и $\bar{a} = 3.7 \times 10^{-4}$ см. Таким образом выбранный средний размер даёт возможность заменить мультидисперсный ансамбль монодисперсным с сохранением полной массы и полной площади пылинок. В химической модели темпы реакций вычисляются через полную площадь поверхности пылевого ансамбля, содержащего такое же число одинаковых частиц размером \bar{a} .

2.2.3. Набор моделей

Чтобы учесть разнообразие дисков вокруг фуоров, рассматривается несколько моделей с разными параметрами диска. Согласно наблюдательным данным в миллиметровом диапазоне, диски вокруг фуоров могут быть довольно массивными и компактными [128,129]. Их массы составляют около 10 – 20% от массы звезды, а радиусы — порядка десятков а.е.

В данной главе рассматриваются диски с массами $M_{\rm disk} = 0.01$ и $0.1 M_{\odot}$ и характеристическими радиусами $R_{\rm c} = 20$ и 100 а.е. Кроме того, как указано в разделе 2.2.2, рассматриваются два распределения пылинок по размерам: со средней и крупной пылью. Это позволяет качественно описать рост пылевых частиц в ходе эволюции пыли в протопланетном диске. Всего рассматривается восемь моделей диска. Дополнительные модели с низкой массой диска $M_{\rm disk} = 0.001 M_{\odot}$ показаны в разделе 2.5.4 для иллюстрации необычного поведения некоторых соединений. В опорной модели, которая рассматривается более подробно, диск имеет характеристический радиус $R_{\rm c} = 100$ а.е., массу $M_{\rm disk} = 0.01 M_{\odot}$ и средний размер пыли.

2.3. Содержание молекулы СО

Молекула CO, одна из наиболее распространённых и легко наблюдаемых в протопланетных дисках, может использоваться не только в качестве индикатора массы (см. Главу 1). Некоторые работы предлагают CO в качестве индикатора прошлой вспышечной активности [102].

Как показано в предыдущей главе, масса газофазного СО в диске хорошо коррелирует с массой диска, хотя его среднее содержание ниже, чем в M3C, из-за разрушения в химических реакциях на поверхности пылинок. При вспышке присутствующий в диске ледяной СО должен десорбировать с поверхности пыли, приводя к росту концентрации газофазного СО во внешних областях диска. Однако эффективное превращение СО в СО₂ на



Рис. 2.3. Среднее содержание газофазного СО в различных моделях диска. Сплошными линиями показаны результаты для моделей со средней пылью, пунктирными линиями — с крупной пылью.

поверхности пылинок может ослабить этот эффект.

Рассмотрим эволюцию содержания СО со вспышкой. На рисунке 2.3 показано, как меняется среднее по диску содержание газофазного СО при вспышке светимости в дисках с различной массой, характеристическим радиусом и размером пыли. Ещё до начала вспышки полное содержание СО варьируется в пределах фактора 3 в зависимости от модели. Эти различия относительно невелики, и важно, что они сопоставимы с вызванным вспышкой ростом содержания СО, который не превышает фактора 2. Можно заключить, что в рамках рассматриваемой модели молекула СО не является хорошим индикатором вспышечной активности, ни текущей, ни прошлой.

В то же время в работах других авторов показано, что содержание СО в газовой фазе в присутствии окружающей оболочки не только существенно возрастает во время вспышки светимости, но и остаётся повышенным на протяжении сотен лет после окончания вспышки [15,102]. Однако, как видно на рисунке 2.3, в отсутствие оболочки такого эффекта не наблюдается. Изменения в содержании СО наиболее существенны именно в оболочке. В данной работе рассматривается объект на более поздней стадии эволюции: осесимметричный протопланетный диск без окружающей оболочки. Именно для оболочки, где плотность и температура газа относительно низкие и присутствует большое количество мелкой пыли, характерны длинные временные масштабы химических превращений и вымерзания. Кроме того, химическое преобразование СО на поверхности пыли в этих моделях либо отсутствует [15], либо менее выражено [102], что приводит к более существенному росту концентрации в газе за счёт сублимации с пыли неразрушенного СО.

Стабильность содержания СО во время вспышки (в пределах порядка величины) не позволяет использовать эту молекулу в качестве индикатора вспышки в объектах без оболочки. Однако СО может быть нормировочной молекулой: содержание другой молекулы-индикатора удобно было бы нормировать на содержание СО. Такая нормировка позволит отличать случаи, когда лучевая концентрация индикатора велика из-за, например, высокой массы диска, от случаев, когда она повышена в результате прошедшей вспышки.

2.4. Сравнение с другими моделями

Для демонстрации особенностей представленной модели было проведено сравнение с ранее описанными в литературе результатами моделирования химического отклика диска с оболочкой на вспышку фуора [102]. Было проведено моделирование состава диска с параметрами, аналогичными работе [102], в которой используется код ProDiMo [11]. Модели отличаются как сеткой химических реакций, так и деталями физической структуры диска и описанием вспышки, поэтому сравнение направлено не на получение как можно более близких результатов, а на демонстрацию особенностей подхода.

Как отмечалось ранее, основное отличие применяемой модели состо-

ит в том, что она описывает объект на более поздней стадии эволюции и не включает в себя окружающую диск оболочку. Тем не менее описание самого диска в моделях очень похоже: идентичный профиль поверхностной плотности с небольшими отличиями в распределении плотности и температуры. В отличие от модели [102], где физическая структура зафиксирована, в данной работе вертикальное распределение плотности в течение вспышки меняется в зависимости от текущей аккреционной светимости. Распределение пыли по размерам одинаково во всём диске, размер пылинок варьируется от 0.005 до 1000 мкм, что также воспроизводится в представленной модели. Однако в нашей модели отсутствует дополнительное население мелкой пыли с максимальным размером 1 мкм, характерное для окружающей оболочки в [102]. Расчётная область в ней ограничена расстоянием 1000 а.е. от звезды вместо 3000 а.е. Форма вспышки, представленная в разделе 2.2.1, качественно похожа на описанную в модели [102], отличаясь лишь более плавным нарастанием и спадом светимости. Также в модели [102] фаза спокойной аккреции длится 10^5 , а не 5×10^5 лет, а вспышка — 100 вместо 70 лет, и аккреционная светимость достигает $100 L_{\odot}$ вместо $200 L_{\odot}$.

На рисунке 2.4 показаны радиальные распределения газофазного СО из работы [102] (модель ProDiMo), а также аналогичные результаты в тестовой модели, отличия которой от [102] описаны выше (модель ANDES). В целом, модели показывают сходные результаты, хотя между ними есть характерные отличия. В обеих моделях между 50 и 150 а.е. понижено содержание газофазного СО, однако в более холодном диске ANDES эта зона смещена внутрь. Также сдвиг может быть обусловлен превращением льда СО в лёд CO₂, которое эффективно удаляет СО из газовой фазы, как описано в разделе 1.4.1. После окончания вспышки профиль СО возвращается к довспышечному в обеих моделях с примерно одинаковыми характерными временами, хотя в модели ANDES из-за отличий в физической структуре,



Рис. 2.4. Проинтегрированное по вертикали содержание газофазного СО до и в разные моменты времени после окончания вспышки. Верхний график показывает результаты модели ProDiMo из работы Rab et al. (2017) [102], на нижнем графике представлена модель из данной работы. Штриховой линией показано распределение до вспышки. Содержание СО нормировано на число ядер водорода.

вызванных отсутствием оболочки, это происходит чуть быстрее.

В отличие от модели ANDES, в которой содержание СО падает на больших расстояниях (R > 300 a.e.), в модели ProDiMo содержание СО во внешнем диске во время вспышки высоко ($\sim 10^{-4}$), а после неё постепенно спадает. Это вызвано замерзанием сублимированного вспышкой СО в оболочке. В модели, представленной в данной работе, оболочка отсутствует, поэтому УФ поле излучения во внешних областях выше. С ростом светимости и УФ поля излучения темп фотодиссоциации растёт, и СО разрушается, а затем постепенно восстанавливается, когда УФ поле снова становится слабее. Разница между моделями на R > 2000 а.е. в основном обусловлена отсутствием оболочки, из-за чего во внешних областях диска отличается УФ поле излучения и тепловая структура, которая определяет темп адсорбции молекул на пыль.

2.5. Молекулы — индикаторы вспышки

В отличие от CO, содержание которого во время вспышки меняется всего в несколько раз, некоторые другие соединения очень чувствительны к вспышке, их содержание меняется на несколько порядков. Если оно существенно возрастает и медленно возвращается к исходному, такие соединения могут служить химическими индикаторами прошлой вспышечной активности фуора.

Возможные индикаторы вспышки можно разделить на две основные группы. К первой группе относятся соединения, содержание которых заметно меняется в течение самой вспышки и возвращается к исходному непосредственно после её окончания. Ко второй группе принадлежат соединения, содержания которых дольше возвращаются к «нормальным» значениям и остаются повышенными в течение продолжительного времени после окончания вспышки. Соединения первой и второй группы описаны в разделах 2.5.1 и 2.5.2, соответственно.

Распределение по диску потенциальных индикаторов вспышки и химические реакции, приводящие к росту их содержаний рассматриваются в разделе 2.5.3. Некоторые соединения, которые демонстрируют нетипичную реакцию на вспышку светимости, представлены в разделе 2.5.4.

2.5.1. Индикаторы текущей вспышки

Для первоначального отбора потенциальных индикаторов вспышки рассмотрим полные содержания молекул и амплитуду их изменения во

72
время вспышки. Это позволит судить о глобальном влиянии вспышки на состав диска. Анализ двумерного распределения отдельных выбранных молекул представлен в разделе 2.5.3.

Для описания поведения молекулы под действием вспышки можно сравнить её полное (проинтегрированное по диску) содержание в диске во время вспышки A_2 (в момент времени 2 на рисунке 2.1) с содержанием перед вспышкой A_1 (в момент времени 1). Будем считать молекулу индикатором текущей вспышки, если более чем в половине рассмотренных моделей (с различной массой и характеристическим радиусом) выполняются следующие условия:

- содержание во время вспышки достаточно велико, $A_2 > 10^{-9}$;
- содержание во время вспышки выросло более чем на два порядка, $\log_{10}(A_2/A_1) > 2.$

Соединения, удовлетворяющие данным критериям, представлены в таблице 2.1. Аналогичные данные для моделей с крупной пылью представлены в таблице 5.1 в Приложении 2.

К непосредственным индикаторам вспышки относятся как относительно простые и распространённые молекулы, например, NH₃, H₂CO и углеводороды, так и более сложные и редкие органические молекулы, такие как HCOOH, CH₃OH, CH₃OCH₃, цианополиины (HC_nN, n = 3, 5, 7, ...)и др. Наиболее чувствительными к повышению светимости оказываются летучие соединения, которые сублимируют с поверхности пылинок благодаря нагреву диска и соответствующему росту темпа тепловой десорбции. В таблице 2.1 они выделены звёздочками (*). Содержание остальных молекул возрастает за счёт запуска ранее дремавших цепочек газофазных реакций, в том числе с участием соединений, сублимированных с поверхности пыли.

Многие из перечисленных в таблице 2.1 сложных органических моле-

кул ранее не были обнаружены в ИК и радио наблюдениях протопланетных дисков. В отсутствие вспышки их предсказанные содержания малы, однако благодаря вспышке могут стать достаточными для детектирования. Поэтому наблюдение дисков во время вспышки светимости может быть удачным способом изучения состава органических льдов в протопланетных дисках.

Таблица 2.1: Изменение содержания некоторых молекул в диске под действием вспышки $\log_{10}(A_2/A_1)$ в порядке убывания содержания во время вспышки A_2 . Указан диапазон значений в четырёх моделях со средним размером пыли. Звёздочкой отмечены молекулы, сублимированные вспышкой с поверхности пыли, кружочком — синтезированные в газофазных процессах.

Соединение		Содержание вспышки А ₂	во	время	$\log_{10}(A_2/A_1)$	
Непосредственные индикаторы вспышки						
*	NH_3	$2.6 \times 10^{-06} \dots 1.2 \times 10^{-05}$			2.22.5	
*	$\rm H_2CO$	$1.3 \times 10^{-06} \dots$	$4.5 \dots 5.7$			
*	C_3H_4	$1.5 \times 10^{-06} \dots$	2.94.4			
*	C_2H_6	$6.8 \times 10^{-07} \dots$	2.23.3			
* ()	CH ₃ OH	$1.0 \times 10^{-07} \dots$.1.4 ×	10^{-06}	3.73.9	
продолжение следует						

продолжение					
Соединение		Содержание во время вспышки A_2	$\log_{10}(A_2/A_1)$		
* ()	НСООН	$3.0 \times 10^{-08} \dots 1.4 \times 10^{-07}$	3.33.6		
*	NH ₂ OH	$1.8 \times 10^{-09} \dots 3.4 \times 10^{-08}$	4.95.4		
*	CH ₃ CHO	$2.3 \times 10^{-08} \dots 7.2 \times 10^{-08}$	$5.1 \dots 5.7$		
*	$\mathrm{H}_{5}\mathrm{C}_{3}\mathrm{N}$	$4.7 \times 10^{-09} \dots 2.1 \times 10^{-08}$	2.83.3		
* ()	C_6H_4	$2.6 \times 10^{-09} \dots 1.5 \times 10^{-08}$	3.03.7		
\bigcirc	$\mathrm{HC}_{5}\mathrm{N}$	$4.1 \times 10^{-09} \dots 1.8 \times 10^{-08}$	4.45.0		
*	CH ₃ OCH ₃	$3.8 \times 10^{-09} \dots 2.4 \times 10^{-08}$	3.16.3		
\bigcirc	$\mathrm{HC}_{7}\mathrm{N}$	$3.7 \times 10^{-09} \dots 2.0 \times 10^{-08}$	5.66.4		
*	H_2S_2	$2.1 \times 10^{-09} \dots 8.0 \times 10^{-09}$	2.63.3		
* ()	$\rm CH_5N$	$1.9 \times 10^{-09} \dots 8.0 \times 10^{-08}$	2.33.4		
\bigcirc	$\mathrm{HC}_3\mathrm{N}$	$1.8 \times 10^{-09} \dots 8.0 \times 10^{-09}$	2.32.8		
*	HCOOCH ₃	$7.8 \times 10^{-10} \dots 1.6 \times 10^{-08}$	6.68.4		
Наблюдаемые в дисках молекулы					
* ()	СО	$5.4 \times 10^{-05} \dots 8.1 \times 10^{-05}$	0.00.3		
*	$\rm CO_2$	$3.3 \times 10^{-05} \dots 4.6 \times 10^{-05}$	0.91.4		
продолжение следует					

продолжение					
Соединение		Содержание во время вспышки A_2	$\log_{10}(A_2/A_1)$		
*	H_2O	$2.0 \times 10^{-05} \dots 1.0 \times 10^{-04}$	0.82.4		
0	0	$1.4 \times 10^{-05} \dots 1.4 \times 10^{-04}$	$0.4 \dots 0.9$		
0	C^+	$3.1 \times 10^{-07} \dots 2.9 \times 10^{-05}$	$0.9 \dots 1.1$		
*	HCN	$1.4 \times 10^{-07} \dots 2.4 \times 10^{-07}$	$1.0 \dots 1.6$		
0	C_2H_2	$1.3 \times 10^{-08} \dots 4.8 \times 10^{-08}$	1.82.3		
*	HNC	$9.4 \times 10^{-09} \dots 2.0 \times 10^{-08}$	1.31.9		
0	SO	$8.0 \times 10^{-09} \dots 1.7 \times 10^{-08}$	$-0.1 \dots 0.3$		
0	ОН	$6.4 \times 10^{-09} \dots 7.0 \times 10^{-08}$	-0.81.7		
* ()	C_3H_2	$3.4 \times 10^{-10} \dots 7.8 \times 10^{-10}$	1.62.1		
0	CS	$9.9 \times 10^{-11} \dots 2.2 \times 10^{-10}$	-0.80.2		
0	CN	$4.0 \times 10^{-11} \dots 7.0 \times 10^{-09}$	0.71.0		
0	C_2H	$2.5 \times 10^{-11} \dots 1.2 \times 10^{-09}$	0.41.0		
\bigcirc	HCO^+	$2.9 \times 10^{-12} \dots 2.6 \times 10^{-11}$	$-1.2\cdots -0.5$		
0	CH^+	$8.3 \times 10^{-14} \dots 3.7 \times 10^{-12}$	0.21.3		
0	N_2H^+	$8.5 \times 10^{-15} \dots 1.5 \times 10^{-13}$	$-2.3\cdots -1.3$		

После публикации результатов данной работы появилась информация о наблюдении сложных органических молекул в диске вокруг фу-

ора V 883 Ориона [81]. С помощью интерферометра ALMA в этом диске были детектированы молекулы CH₃OH, CH₃COCH₃, CH₃CN, CH₃CHO, HCOOCH₃ и HCOOH и определены их относительные содержания. При этом CH₃CHO, HCOOCH₃ и CH₃COCH₃ уверенно зарегистрированы в дисках впервые. Для молекул CH₃OH, CH₃CN, CH₃CHO, HCOOCH₃ и HCOOH наблюдаемые содержания совпадают с получеными в данной диссертационной работе в пределах двух порядков величины. Учитывая, что параметры системы и диска в модели совпадают лишь приблизительно (в частности, V 883 Ориона имеет диск массой $0.3 - 0.57 M_{\odot}$ и испытывает вспышку амплитудой $\approx 400 L_{\odot}$ [81]), такое согласие представляется вполне убедительным. Для впервые зарегистрированных CH₃CHO и HCOOCH₃ наблюдаемые содержания лежат в пределах, указанных в таблицах 2.1 и 5.1. Появление этих наблюдательных данных подкрепляет вывод о перспективах наблюдения органических молекул в дисках фуоров.

Из наблюдавшихся в V 883 Ориона молекул наша модель не воспроизводит содержание ацетона CH₃COCH₃, которое в наблюдениях на 6 порядков выше. Это может быть связано с недостаточно подробным описанием химии ацетона в применяемой модели. Неучтённые здесь реакции синтеза ацетона на поверхности пылинок описаны, например, в работе [130]. Также в V 883 Ориона наблюдались сложные органические молекулы с-H₂COCH₂ и CH₃SH [81], которые в нашей модели отсутствуют.

Среди молекул, ранее наблюдавшихся в протопланетных дисках, расчёты показывают заметный рост содержаний NH₃, H₂CO, HCOOH, CH₃OH и HC₃N во время вспышки. Молекулярные ионы HCO⁺ и N₂H⁺, наоборот, разрушаются, соответственно, газофазными H₂O и CO₂, сублимированными вспышкой с поверхности пыли, и поэтому их содержание падает. Как уже упоминалось, это свойство иона HCO⁺ ранее использовалось, чтобы подтвердить наличие прошлой вспышечной активности у маломассивных протозвёздных ядер [103]. Другие наблюдавшиеся в дисках молекулы не удовлетворяют описанным выше критериям. Они представлены в нижней части таблицы 2.1. Среди них можно выделить также C₂H₂ и C₃H₂, содержание которых в некоторых моделях возрастает почти на два порядка величины.

Разница между моделями с пылью разного размера слабо заметна на фоне отличий между моделями с одинаковым размером пыли, но разными массами и радиусами дисков (ср. таблицу 2.1 и таблицу 5.1 в Приложении 2), что не позволяет отличить диски с разным размером пыли по реакции их химического состава на вспышку. В моделях с крупной пылью суммарная площадь поверхности пылинок меньше, следовательно, поверхностная химия менее активна, и изменение состава льда происходит медленнее. С другой стороны, в начальном составе диска уже присутствуют льды из молекулярного облака, что сглаживает различие в химическом составе дисков с крупной и средней пылью.

2.5.2. Индикаторы прошедшей вспышки

Чтобы выбрать соединения, аномальное содержание которых может служить индикатором вспышки после её окончания, необходимо оценить характерные времена возвращения их содержаний к исходным значениям. Они будут зависеть от природы химических процессов, отвечающих за изменение содержаний, которые могут меняться по разным причинам и в разном направлении. Например, молекула может переходить из ледяной фазы в газовую вследствие нагрева, а после вспышки снова постепенно оседать на поверхность пыли с характерным временем адсорбции. Молекула может, наоборот, диссоциировать в УФ поле, повышенном благодаря вспышке, а когда оно вернётся к спокойному состоянию, снова формироваться с характерными временами, соответствующими скорости реакции.

Для описания химической эволюции диска после вспышки введём понятие характерного времени химической релаксации τ_{ch} . Это промежуток времени с момента окончания вспышки, за который разница между текущим полным содержанием молекулы в диске и её содержанием до вспышки упадёт вдвое в логарифмическом масштабе:

$$\log_{10}(A(\tau_{\rm ch})/A_1) = 0.5 \log_{10}(A_2/A_1).$$
(2.2)

Окончанием вспышки будем считать момент, когда аккреционная светимость начинает спадать (момент 2 на рисунке 2.1). Тогда соединение, которое мгновенно возвращается к спокойному содержанию вслед за вспышкой, будет иметь $\tau_{\rm ch} \approx 20$ лет, что соответствует продолжительности фазы спада светимости.

Времена химической релаксации были рассчитаны для каждой газофазной молекулы, у которой $\log_{10}(A_2/A_1) > 1$ во всех восьми моделях диска (см. раздел 2.2.3). Наибольший интерес представляют потенциально наблюдаемые соединения, поэтому льды были исключены из рассмотрения (хотя они присутствуют в химической модели). По этой же причине не рассматриваются соединения, содержание которых относительно числа ядер водорода и до, и во время вспышки не превышает 10^{-9} . Также характерные времена химической релаксации потенциальных индикаторов прошлой вспышки должны быть больше 20 лет.

На основании данных критериев были выбраны потенциальные индикаторы прошлых вспышек, обладающие высокими значениями τ_{ch} более чем в половине рассмотренных моделей. Такими оказались следующие молекулы: формальдегид H₂CO, гидроксиламин NH₂OH, ацетальдегид CH₃CHO, диметиловый эфир CH₃OCH₃, метилформиат HCOOCH₃, пропаргил C₃H₃ и ацетилен C₂H₂. На рисунке 2.5 для каждой из этих молекул показано характерное время химической релаксации и вызванное вспышкой изменение содержаний. Каждый символ соответствует одной из моделей.



Рис. 2.5. Вызванное вспышкой изменение полного содержания в диске некоторых молекул $\log_{10}(A_2/A_1)$ в разных моделях в зависимости от их характерного времени химической релаксации τ_{ch} . Размер маркеров отражает содержание во время вспышки A_2 . Незакрашенные маркеры соответствуют соединениям с низким содержанием $(A_1 или A_2 < 10^{-9})$ или $\tau_{ch} < 20$ лет. Жёлтой стрелкой обозначен формальдегид H_2CO в модели, в которой он разрушается во время вспышки $(\log_{10}(A_2/A_1) < 0)$. Серым цветом закрашена область $\tau_{ch} < 20$ лет, к которой относится большинство остальных соединений.

Как видно из рисунка 2.5, из выделенных молекул самым инертными и медленно восстанавливающимся является гидроксиламин NH₂OH с временем релаксации $\tau_{ch} \gtrsim 10^3$ лет. Его содержание увеличивается на 5–6 порядков величины и во время вспышки составляет около 10^{-9} – 10^{-8} , что делает его потенциально детектируемым во вспышечных объектах. Содержание метилформиата HCOOCH₃ во время вспышки чуть ниже, при том, что вспышка увеличивает его на 7–8 порядков. На нижней границе допустимых содержаний находится и C₃H₃, содержание которого превышает 10^{-9} лишь во время вспышки, а затем снова падает ниже 10^{-11} .

Три из перечисленных молекул обладают относительно короткими

временами химической релаксации. Это CH_3CHO , CH_3OCH_3 и C_2H_2 , у которых $\tau_{ch} \leq 20-50$ лет в большинстве моделей. Несмотря на то, что их содержание растёт не так значительно, оно всё равно может оставаться повышенным сразу после окончания вспышки.

Из выбранных молекул наиболее перспективным с точки зрения наблюдений оказывается формальдегид. Его содержание во время вспышки возрастает на 4–6 порядков и возвращается к исходному за 30–120 лет. Почти во всех моделях содержание формальдегида во время вспышки довольно высокое, ~ 10^{-6} . Единственная модель, в которой вспышка светимости уменьшает содержание формальдегида, отмечена стрелкой на рисунке 2.5. В этой модели с протяжённым маломассивным диском ($R_c = 100$ а.е., $M_{\rm disk} = 0.01 M_{\odot}$) и крупной пылью содержание H₂CO также быстро возвращается к довспышечному. Кроме того, довспышечное содержание ледяного формальдегида в ней невелико. Это обусловлено тем, что в данной модели из-за малой площади поверхности пыли и сравнительно низких плотностей газа подавлены пути формирования формальдегида в спокойной фазе химической эволюции.

На рисунке 2.6 показаны полные содержания выбранных молекул в газовой и ледяной фазах для одной из моделей диска. Сравнивая эволюцию содержаний в газовой и ледяной фазах, можно понять, связана ли она с тепловой десорбцией, и оценить основные пути формирования и разрушения этих соединений.

Для части соединений изменения содержаний вызваны именно тепловой десорбцией в нагретом вспышкой диске. Молекулы H₂CO, CH₃CHO, CH₃OCH₃ и HCOOCH₃ перед вспышкой находятся преимущественно в ледяной фазе. Затем во время вспышки этот лёд сублимирует, освобождая молекулы и выпуская их в газовую фазу, а после окончания вспышки молекулы оседают обратно на поверхность пыли. Видно, что их содержание в газе во время вспышки примерно равно их содержанию на пыли до вспыш-



Рис. 2.6. Полное содержание в диске различных соединений в газовой (верхняя панель) и ледяной (нижняя панель) фазе до, во время и через 20 лет после вспышки (моменты времени 1, 2 и 3 на рисунке 2.1) в опорной модели $(M_{\rm disk} = 0.01 \, M_{\odot}, R_{\rm c} = 100 \, {\rm a.e.}, {\rm средняя пыль}).$

ки. Причём метилформиата HCOOCH₃ даже во время вспышки больше в ледяной фазе, чем в газовой, что свидетельствует о том, что бо́льшая часть этого льда находится в холодных отдалённых частях диска и не сублимирует под действием вспышки. В то же время H₂CO, CH₃CHO и CH₃OCH₃ переходят в газовую фазу почти полностью. После окончания вспышки они возвращаются на остывшие пылинки с характерными временами, равными времени адсорбции молекул на пыль.

У других молекул химические реакции, индуцированные вспышкой, несколько сложнее. Содержание гидроксиламина NH₂OH во время вспышки резко увеличивается и в газовой, и в ледяной фазе, причём содержание на поверхности пыли превышает газофазное более чем на порядок. Эта молекула эффективно формируется в ледяной фазе, а затем за счёт реактивной десорбции попадает в газ. Интересно отметить, что после вспышки содержание гидроксиламина продолжает увеличиваться. Более подробно эта молекула будет рассмотрена в разделе 2.5.3.

Молекулы C_3H_3 и C_2H_2 до вспышки присутствуют в основном в газе, в ледяной фазе их содержание существенно ниже. Во время вспышки их газофазное содержание растёт благодаря увеличению темпов производящих эти молекулы реакций в газовой фазе. Темп реакций возрастает как за счёт роста температуры, так и из-за роста содержаний в газовой фазе молекул-прекурсоров, сублимированных вспышкой с поверхности пыли.

На рисунке 2.7 показано, как в течение вспышки меняется содержание некоторых молекул в разных моделях диска. Все показанные соединения демонстрируют динамику, сходную с поведением СО на рисунке 2.3: с началом вспышки их содержания растут на несколько порядков, а после её окончания медленно возвращаются к исходным. Заметно, что амплитуды и временные шкалы здесь существенно больше по сравнению с СО. Спад содержаний действительно происходит медленно, особенно у формальдегида H_2CO и гидроксиламина NH_2OH . В большинстве моделей содержание молекул остаётся существенно повышенным, даже когда светимость полностью возвращается к спокойному значению (t = 71 год).

Рисунок 2.7 позволяет проанализировать роль различных параметров модели. На некоторые молекулы изменение параметров диска не оказывает сильного влияния. Так, поведение C₂H₂ и CH₃CHO сходно во всех моделях, а их содержание почти всегда варьируется в пределах лишь 1–2 порядков величины. Для H₂CO и NH₂OH отличия более существенны. В моделях с крупной пылью их содержания после вспышки падают гораздо быстрее, чем в соответствующих моделях со средним размером пыли.

Модель с $M_{\rm disk} = 0.01 M_{\odot}, R_{\rm c} = 100$ а.е. и крупной пылью (штриховая фиолетовая линия) выделяется контрастным поведением формальдегида



Рис. 2.7. Полное содержание некоторых молекул-индикаторов вспышки в различных моделях в зависимости от времени. Модели со средней пылью обозначены сплошными линиями, с крупной пылью — штриховыми.

 H_2CO . Именно этой модели соответствует жёлтая стрелка на рисунке 2.5. Кроме того, она обладает наиболее высоким довспышечным содержанием газофазного H_2CO . В этой модели перед вспышкой очень мало ледяного формальдегида, поэтому его сублимация вследствие нагрева диска не приводит к существенному увеличению содержания в газовой фазе. В то же время имеющийся во внешних частях диска газофазный формальдегид уничтожается фотодиссоциацией, темп которой во время вспышки возрастает. Сочетание этих процессов приводит к одному из немногих примеров уменьшения содержания газофазного соединения под действием вспышки. В остальных моделях фотодиссоциация тоже происходит, но разрушенный ею H_2CO с большим запасом компенсируется сублимированным с поверхности пыли. Присутствующий в диске гидроксиламин NH₂OH можно представить в виде суммы двух отдельных составляющих, каждая из которых эволюционирует на своих временных масштабах: одна довольно быстро исчезает после вспышки, а вторая, наоборот, разрушается очень медленно. Эти составляющие соответствуют двум резервуарам NH₂OH, находящимся в разных участках диска. Соотношение между количеством вещества в резервуарах зависит от модели. В трёх моделях с низким $\tau_{ch} \approx 20$ – 30 лет ($M_{disk} = 0.01 M_{\odot}$, $R_c = 100$ а.е. и $R_c = 20$ а.е., крупная пыль; $M_{disk} = 0.1 M_{\odot}$, $R_c = 100$ а.е., средняя пыль) основным является первый, в остальных моделях — второй. Более подробно формирование и разрушение гидроксиламина, а также других молекул, обсуждается в следующем разделе.

2.5.3. Двумерная химическая структура диска

В данном разделе рассматриваются двумерные распределения по протопланетному диску выделенных ранее молекул и обсуждаются реакции их формирования и разрушения во время и по прошествии вспышки светимости.

Молекулы по-разному ведут себя во время вспышки, так как производятся в химических процессах разного вида. Можно выделить три основных сценария, по которым содержание химических соединений в газе возрастает: десорбция уже имеющихся молекул с поверхности пыли, образование в газовой фазе, образование в ледяной фазе с последующей десорбцией. В свою очередь, исчезновение газофазных соединений при вспышке может происходить из-за фотодиссоциации в усилившемся поле излучения или в результате повышения эффективности двухчастичных реакций разрушения вследствие изменения физических условий.

На рисунке 2.8 показаны примеры распределения по диску молекул H₂CO, NH₂OH и C₂H₂ в двух моделях, отличающихся размером пыли.

Представлены содержания в моменты до, во время и через τ_{ch} после момента 2 на рисунке 2.1 (отметим, что на рисунке 2.8 для каждой панели указано время, прошедшее с момента 1). Эти молекулы представляют три описанных выше сценария химического отклика на вспышку.

Химические процессы, происходящие в протопланетном диске под влиянием вспышки светимости, рассмотрены более детально в работе [A3]. Отметим, что результаты данной диссертационной работы, опубликованные в [A3], представлены в Главе 3, и упоминаемый в Главе 2 анализ химических процессов не входит в их число. В работе [A3] показано, что для большинства соединений наиболее значимым процессом является переход из ледяной фазы в газовую. Например, изменение содержаний CO, H₂CO и CH₃CHO почти во всех моделях объясняется исключительно десорбцией и вымерзанием. Чувствительность каждого из дисков ко вспышке в этом сценарии зависит от количества льда перед вспышкой, характерные времена возвращения — от темпа адсорбции, который наиболее чувствителен к плотности среды. Десорбция происходит очень быстро, почти синхронно с изменением интенсивности, а возвращение на поверхность пыли может быть гораздо более медленным.

Показанный в верхнем ряду рисунка 2.8 формальдегид перед вспышкой имеет довольно высокое содержание в ледяной фазе ($\sim 10^{-6}-10^{-5}$). Во время вспышки этот ледяной формальдегид десорбирует, а затем возвращается назад, но даже через несколько десятков лет после окончания вспышки его газофазное содержание в некоторых областях существенно превышает исходное значение. Это холодные области на периферии диска $\gtrsim 100$ а.е., где плотность газа невысока и вымерзание происходит медленно.

В то же время в модели с крупной пылью, показанной во втором ряду на рисунке 2.8, формальдегид перед вспышкой почти отсутствует и в газовой, и в ледяной фазе. Именно эта модель разительно отличается от остальных на рисунках 2.5 и 2.7. Изначально в обеих моделях обилие ледя-



Рис. 2.8. Распределение молекул по диску в двух моделях с $R_c = 100$ а.е. и $M_{\rm disk} = 0.01 M_{\odot}$: со средней ($\bar{a} = 3.7 \times 10^{-5}$ см) и крупной ($\bar{a} = 3.7 \times 10^{-4}$ см) пылью до (0 лет), во время (51 год) и через $\tau_{\rm ch}$ лет после вспышки. Указанное время отсчитывается от момента 1 на рисунке 2.1. В верхней половине каждого графика показано содержание в газе, в нижней — на пыли, нормированное на концентрацию газа $n_{\rm gas}$. Сплошные чёрные контуры описывают поверхность $A_{\rm V} = 1$, чёрным пунктиром показана шкала высот H = 1. Оранжевый контур соответствует оптической толщине $\tau = 1$ в линии перехода $3_{03} - 2_{02}$ пара-формальдегида на $\lambda = 3$ мм, голубой контур соответствует единичной оптической толщине в континууме на 3 мкм.

ного формальдегида, заимствованного из родительского облака, довольно высоко $(n_{iH_2CO}/n_{gas} = 6 \times 10^{-6})$. В модели со средней пылью он продолжает формироваться на поверхности пыли в течение всех 500 тыс. лет спокойной стадии эволюции диска. В модели с крупной пылью, где площадь её поверхности меньше, темп формирования не так высок. Зато возрастает темп разрушения в фотореакциях, поскольку при большем размере пыли диск более прозрачен для УФ излучения. В результате в модели с протяжённым маломассивным диском и крупной пылью темп разрушения H_2CO на пыли превышает темп формирования, и к моменту начала вспышки его содержание уже очень мало (< 10^{-10}).

В отдельных случаях образование соединения во время вспышки происходит на поверхности пыли. В частности, гидроксиламин NH₂OH начинает эффективно формироваться в ледяной фазе и попадает в газ благодаря реактивной десорбции. Реакция формирования гидроксиламина из iNH₂ и iOH становится эффективной именно во время вспышки благодаря десорбции водорода iH, который в спокойных условиях участвует в реакции с iNH₂, подавляющей формирование гидроксиламина в пользу ледяного аммиака iNH₃. Данный механизм генерации гидроксиламина в протопланетном диске во время вспышки также описан в работе [A3].

Описанный механизм эффективен в холодных внешних областях диска, на расстоянии десятков а.е. от звезды. Как видно в третьем ряду на рисунке 2.8, до вспышки лёд NH₂OH присутствует только во внутреннем диске, на расстоянии около 10 а.е. и меньше. Однако во время вспышки он появляется на ~100 а.е. На таких расстояниях характерные времена адсорбции велики, и он переходит в ледяную фазу очень медленно. Тот факт, что даже через 2 тыс. лет сформированный вспышкой гидроксиламин исчезает далеко не полностью, говорит о необратимости вызванных вспышкой химических изменений. Полное содержание гидроксиламина в диске через 10 тыс. лет после вспышки превосходит довспышечное на два порядка. Кроме того, ледяной гидроксиламин содержится и во внутреннем диске. Он сублимирует под действием вспышки и после неё относительно быстро замерзает, так же как формальдегид в модели со средней пылью. Поэтому общее поведение NH₂OH в конкретном диске будет зависеть от соотношения между количеством молекулы во внутренней и внешней областях. В модели со средней пылью основным является резервуар NH₂OH во внешнем диске, поэтому после вспышки его суммарное содержание спадает медленно. В случае крупной пыли (четвёртый ряд на рисунке 2.8) зона образования NH₂OH на пыли находится ближе к звезде, в более тёплой области на ≈20–30 а.е. Здесь его содержание ниже и возвращается к довспышечному всего через несколько десятков лет. В этой модели основным является внутренний, уже присутствующий до вспышки резервуар гидроксиламина. Тот факт, что доминирующая область образования гидроксиламина меняется в зависимости от модели, объясняет наличие двух групп точек на рисунке 2.5.

Третий сценарий химического влияния вспышки проиллюстрирован на примере ацетилена C_2H_2 , который показан в двух нижних рядах на рисунке 2.8. Во время вспышки он присутствует в толстом молекулярном слое в атмосфере диска, а также в плоскости диска. В плоскости диска C_2H_2 формируется в основном в реакции $C_3H_3 + O \rightarrow C_2H_2 + HCO$, в молекулярном слое — в реакции $C_2H + H \rightarrow C_2H_2$ и при фотодиссоциации $C_3H_2 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + C$. Стремительный процесс формирования уравновешивается фотодиссоциацией, темп которой также возрастает из-за вспышки.

В свою очередь C_3H_3 образуется в реакции $C_3H_4 + H \rightarrow C_3H_3 + H_2$, а C_3H_4 десорбирует с нагретой пыли. При обоих значениях размера пыли сценарий образования остаётся неизменным для этой молекулы. Отметим также, что C_3H_3 не только является прекурсором C_2H_2 в цепочке реакций, активирующейся во время вспышки. Сама эта молекула также выделена как индикатор прошлой вспышечной активности (см. раздел 2.5.2 и рисунок 2.5).

На рисунке 2.8 также показаны изолинии оптической толщины для формальдегида и ацетилена, позволяющие оценить наблюдательные перспективы для этих молекул. Оранжевым контуром обозначена поверхность $\tau = 1$ в линии на длине волны 3 мм, соответствующей переходу $3_{03} - 2_{02}$ молекулы пара-формальдегида. Излучение в этой линии было зарегистрировано у нескольких протопланетных дисков: у LkCa 15 на 30-метровом телескопе IRAM [131]; у AB Возничего на IRAM/NOEMA [132]; у HD 163296 на ALMA [133]. Во время и после вспышки излучение является оптически толстым на больших расстояниях от звезды.

Ацетилен как симметричная молекула обладает нулевым дипольным моментом и соответствующим запретом на вращательные переходы, поэтому его практически невозможно наблюдать в миллиметровом диапазоне, в частности на ALMA. Однако его инфракрасные линии наблюдались на длинах волн около 3 мкм [134] и 13 мкм с помощью *Spitzer* и TEXES [135–137]. Возможность наблюдения этой молекулы в ИК можно оценить по оптической толщине в континууме: излучение в линии молекулы будет наблюдаться только в том случае, если оно рождается выше поверхности $\tau_{3\mu m} = 1$.

Проведённые оценки позволяют предварительно сказать, что избыточное излучение формальдегида в линии $3_{03} - 2_{02}$ теоретически возможно наблюдать до нескольких десятков лет после окончания вспышки. Оно должно образовывать кольцо во внешних областях диска. В то же время колебательно-вращательный спектр ацетилена около 3 мкм, вероятно, будет теряться на фоне яркого излучения в пылевом континууме даже во время вспышки, когда его содержание становится существенно повышенным.



Рис. 2.9. Содержание в диске некоторых молекул с нестандартным поведением. В отличие от всех остальных рисунков, представленных в данной работе, содержание метанола показано в моделях с $M_{\rm disk} = 0.01$ и $0.001 M_{\odot}$, поскольку именно в маломассивных дисках его поведение особенно интересно.

2.5.4. Нестандартное поведение молекул

Введённое понятие времени химической релаксации τ_{ch} (см. уравнение (2.2)) подходит для описания тех молекул, содержание которых после вспышки спадает монотонно. Некоторые молекулы, в том числе CH₃OH, CH₅N и HNC, не являются таковыми. Их содержание, увеличенное вспышкой, после её окончания резко падает до низких значений, однако затем вновь начинает расти, и в течение нескольких сотен лет остаётся повышенным по сравнению с довспышечным почти на порядок величины. Также необычной можно назвать динамику содержания газофазного гидроксила OH: сразу после окончания вспышки оно оказывается заметно ниже, чем до вспышки, что в целом нехарактерно для молекул в газовой фазе.

На рисунке 2.9 показано, как меняется во время и после вспышки содержание ОН, CH₃OH и HNC. Наиболее необычным кажется поведение метанола в маломассивных дисках, поэтому эта молекула показана в моделях с массой диска $0.01 M_{\odot}$ и дополнительных моделях с $M_{\rm disk} = 0.001 M_{\odot}$. В этих моделях содержание CH₃OH после вспышки повышено на 2–3 порядка величины, и в некоторых случаях превышает содержание во время

вспышки, особенно в моделях с крупной пылью.

2.6. Положения, выносимые на защиту

По результатам второй главы на защиту выносятся следующие положения:

- Показано, что во время вспышки фуора содержание многих соединений, в том числе сложных органических молекул, повышается на несколько порядков, благодаря чему они могут быть задетектированы. Предсказанные вспышечные содержания молекул СH₃CHO и HCOOCH₃ хорошо согласуются с полученными впоследствии на ALMA независимыми наблюдательными данными для фуора V 883 Ориона.
- Определены молекулы, высокое содержание которых в дисках может свидетельствовать о прошлой вспышечной активности молодого звёздного объекта. Установлено, что содержание H₂CO, NH₂OH, CH₃CHO, CH₃OCH₃, HCOOCH₃, C₃H₃ и C₂H₂ остаётся повышенным от десятков до тысяч лет после окончания вспышки.

Глава 3. Динамика летучих соединений в протопланетных дисках

Для протопланетных дисков, в особенности в течение первых сотен тысяч лет эволюции, характерны различные динамические процессы: образование спиралей и сгустков под действием гравитационной неустойчивости, движение растущей пыли относительно газа, аккреция вещества на звезду. В предыдущих главах в целях более детального описания химической эволюции диска эти процессы рассматривались лишь приблизительно. В этой главе будет подробно рассмотрено влияние динамики газа и глобальной эволюции диска на химический состав его вещества.

В данной главе рассматривается динамическая эволюция в диске наиболее обильных летучих молекул — H₂O, CO₂, CH₄ и CO — которые в условиях протопланетного диска могут находиться как газовой, так и в ледяной фазе. Представлена обновлённая модель двумерного самогравитирующего протопланетного диска с эволюцией пыли FEOSAD, в которую добавлен модуль эволюции летучих соединений с учётом их влияния на фрагментацию пыли. По результатам моделирования анализируется состав ледяных мантий пылинок и его эволюция, а также влияние наличия ледяных мантий на эволюцию пыли.

Принятая модель перехода летучих соединений между газовой фазой и ледяными мантиями подробно описана в разделе 3.2. Основные свойства модели диска и особенности включения в неё летучих соединений представлены в разделе 3.3. Проанализированы полученные в моделях распределения газа и пыли (раздел 3.4), распределения летучих соединений (раздел 3.5) и состав ледяных мантий пылинок (раздел 3.6). Основные результаты по данной главе опубликованы в работах [A3] и [A4].

3.1. Введение

Летучие соединения в протопланетном диске могут находиться как в газовой фазе, так и на поверхности пылинок. Обычно к ним относят молекулы с низкой (<800 K) температурой сублимации, покрывающие тугоплавкие ядра пылинок, вещество которых сублимирует при температурах 800–2000 K. Летучие соединения (или просто летучие) представляют существенную долю вещества диска — количество льда на поверхности пыли в холодных областях сравнимо с количеством тугоплавких составляющих пыли [107, 138–140].

Распределение летучих в диске удобно описывать с помощью понятия линии льдов. Можно сказать, что линия льдов — это граница между той частью диска, где соединение находится преимущественно в газе, и областью, где оно находится в твёрдой, ледяной фазе. С линиями льдов ассоциировано понятие «температуры сублимации» при которой происходит фазовый переход. Иногда линии льдов проводят по некоторым фиксированным характерным температурам сублимации [40, 141], однако их положение также зависит от плотности вещества. Более строго положение линии льдов можно определить через сравнение темпов адсорбции и десорбции молекулы [88, 142, 143].

Линии льдов в диске не фиксированы, они могут сдвигаться в ответ на изменение физических условий. В частности, их положение может меняться вследствие уменьшения светимости центрального источника [144] и радиального дрейфа пыли [145, 146]. И наоборот, линии льдов сами могут влиять на дрейф пыли [147]. В дисках вокруг фуоров линии льдов могут сдвигаться под действием вспышек светимости и вызывать изменения в параметрах пыли. Возможные признаки подобных изменений идентифицированы в наблюдениях [108]. Кроме того, десорбировавшие под действием вспышки соединения могут подвергаться предпочтительной адсорбции на уже покрытую льдом пыль, что приводит к преимущественному обмерзанию ледяных пылинок и их росту [111]. Динамика летучих CO₂ и CO в дисках вокруг фуоров ранее рассматривалась в работе [15].

Поскольку ледяная фаза летучих соединений привязана к пылевой составляющей диска, эволюция летучих соединений тесно связана с эволюцией пыли. Сочетание полноценной астрохимической модели с динамической моделью диска — трудоёмкая задача с точки зрения вычислений. Существуют работы, в которых рассматривается химическая и гидродинамическая эволюция самогравитирующего диска и влияние гравитационной неустойчивости на состав газа [14,148,149]. Такие модели показывают, что наиболее существенный вклад в газофазное содержание многих молекул вносят адсорбция и десорбция [148]. Ряд работ, сочетающих адсорбцию/десорбцию с динамикой пыли, посвящён именно поведению летучих соединений в окрестности линий льдов [150–154].

Линии льдов наиболее обильных летучих соединений и соответствующие им изменения физических условий в диске могут влиять на свойства пыли и приводить к резким скачкам в их пространственном распределении. Существует несколько механизмов, обеспечивающих это влияние. Широко обсуждается воздействие льдов на критическую скорость столкновения, при которой начинается фрагментация пылинок [155, 156]. Далее данная критическая скорость будет называться скоростью фрагментации. Ледяные мантии способны увеличить скорость фрагментации, т.е. смягчить фрагментационный барьер, ограничивающий рост пыли: пылинки будут слипаться, а не фрагментировать при столкновении на более высоких скоростях. Это может привести к изменению распределения пылинок по размерам и вызвать наблюдаемые изменения в излучении пыли [157]. В частности, одно из предложенных объяснений повсеместно наблюдаемых в пылевом континууме кольцевых структур в протопланетных дисках включает в себя повышенную липкость или наоборот хрупкость пылинок в окрестности линий льдов, в особенности воды, что провоцирует локальное накопление пыли [143, 146, 147]. На более поздних стадиях эволюции условия в окрестности линий льдов также могут быть благоприятными для роста пыли и образования планетеземалей [158, 159].

В Главах 1 и 2 данной работы рассматривалась комплексная астрохимическая модель квази-стационарного протопланетного диска с упрощённой физической структурой. В данной главе, наоборот, лишь относительно простые химические процессы — адсорбция и десорбция летучих — включены в детальную гидродинамическую модель диска с эволюцией пыли и самогравитацией FEOSAD [19]. Ранее присутствие летучих соединений было рассмотрено в этой модели без учёта эволюции пыли [15]. В рамках данной работы в модель FEOSAD добавлена адсорбция и десорбция четырёх основных летучих соединений (H₂O, CO₂, CH₄ и CO) на два населения пыли, обновлена модель роста пыли, добавлено влияние ледяных мантий на скорость фрагментации. Обновлённая модель позволяет рассчитать, как меняется распределение по диску летучих в газовой фазе и на поверхности мелкой и крупной пыли на масштабе времени жизни диска, и продемонстрировать влияние ледяных мантий на эволюцию пыли.

В модели FEOSAD рассмотрены следующие физические процессы: самогравитация диска; турбулентная вязкость, описанная параметризацией Шакуры-Сюняева [160]; радиативное охлаждение; нагрев излучением звезды и фоновым межзвёздным излучением, вязкий нагрев; дрейф пыли относительно газа и обратное влияние пыли на динамику газа. Более подробное описание модели можно найти в работе [19]. Далее приведены основные характеристики модели, важные в контексте моделирования динамики летучих соединений.

Газовая и пылевая компоненты в модели эволюционируют совместно

и взаимодействуют друг с другом посредством общего поля тяготения и силы трения с учётом обратного влияния пылинок на газ. Соответствующий аналитический метод описан и протестирован в работе [161]. Изначально вся пыль принадлежит к населению мелкой субмикронной пыли, а в процессе коллапса облака и формирования диска она начинает расти, и формируется дополнительная популяция крупной пыли. В отличие от мелкой пыли, которая «вморожена» в газ и движется строго вместе с ним, крупные пылинки могут двигаться относительно газа.

В данной работе в FEOSAD была добавлена эволюция летучих соединений — наиболее обильных молекул, которые могут переходить между газовой и ледяной фазами. Рассматриваются их содержания в газовой фазе и в виде льда отдельно на поверхности мелких и крупных пылинок.

3.2. Фазовые переходы летучих соединений

Пусть некоторое летучее соединение может находиться в диске либо в газе, либо в виде льда на поверхности пылинок. Рассмотрим случай, когда в среде присутствуют два населения пыли: крупная и мелкая пыль. В некоторой точке диска содержание соединения *s* в разных фазах описывается поверхностной плотностью: Σ_s^{gas} — в газовой фазе, Σ_s^{sm} — на поверхности мелкой пыли, Σ_s^{gr} — на поверхности крупной пыли. Фазовые превращения летучего соединения можно описать с помощью следующей системы уравнений [15]

$$\frac{\mathrm{d}\Sigma_s^{\mathrm{gas}}}{\mathrm{d}t} = -\lambda_s \Sigma_s^{\mathrm{gas}} + \eta_s^{\mathrm{sm}} + \eta_s^{\mathrm{gr}}, \qquad (3.1)$$

$$\frac{\mathrm{d}\Sigma_s^{\mathrm{sm}}}{\mathrm{d}t} = \lambda_s^{\mathrm{sm}}\Sigma_s^{\mathrm{gas}} - \eta_{\mathrm{sm}}^s, \qquad (3.2)$$

$$\frac{\mathrm{d}\Sigma_s^{\mathrm{gr}}}{\mathrm{d}t} = \lambda_s^{\mathrm{gr}}\Sigma_s^{\mathrm{gas}} - \eta_s^{\mathrm{gr}}.$$
(3.3)

Здесь $\lambda^{\rm sm}_s$ и $\lambda^{\rm gr}_s~({\rm c}^{-1})$ — темпы адсорбции из газовой фазы на мел-

кую и крупную пыль, соответственно, $\lambda_s = \lambda_s^{\rm sm} + \lambda_s^{\rm gr}$ — суммарный темп адсорбции. Аналогично, $\eta_s = \eta_s^{\rm sm} + \eta_s^{\rm gr}$ (г см⁻² с⁻¹), где $\eta_s^{\rm sm}$ и $\eta_s^{\rm gr}$ — темпы десорбции с мелкой и крупной пыли. Темп десорбции включает две составляющих: тепловую десорбцию и фотодесорбцию: $\eta_s^{\rm sm} = \eta_s^{\rm th,sm} + \eta_s^{\rm ph,sm}$ и $\eta_s^{\rm gr} = \eta_s^{\rm th,gr} + \eta_s^{\rm ph,gr}$.

При выбранном подходе темп десорбции не зависит от содержания молекулы на поверхности пыли Σ_s^{sm} и Σ_s^{gr} , что подразумевает нулевой порядок десорбции, характерный для летучих с высоким содержанием. В этом случае считается, что только самый верхний слой ледяной мантии способен покинуть поверхность пыли, что справедливо для многослойных мантий. Лабораторные исследования показывают, что для условий, близких к условиям в M3C, десорбция различных молекул хорошо описывается моделью нулевого порядка [162–164].

В следующих подразделах описано вычисление темпов аккреции и десорбции для двух населений пыли в зависимости от условий в среде. Для удобства изложения индекс *s*, обозначающий соединение, опускается.

3.2.1. Тепловая десорбция

Коэффициент скорости реакции для тепловой десорбции молекулы с поверхности пыли можно записать как [165]

$$k_{\rm td} = \sqrt{\frac{2N_{\rm ss}E_{\rm b}}{\pi^2 m_{\rm sp}}} \exp\left(-\frac{E_{\rm b}}{k_{\rm B}T}\right),\tag{3.4}$$

где $N_{\rm ss}$ (см⁻²) — плотность активных центров, в которых могут происходить реакции, на поверхности пыли, $E_{\rm b}$ (эрг) — энергия связи молекулы с поверхностью (энергия десорбции), $m_{\rm sp}$ (г) — масса молекулы, T — температура. В случае десорбции нулевого порядка массовый темп десорбции с поверхности пыли, приходящийся на единицу поверхностной плотности диска, $\eta_{\mathrm{td}}~(\Gamma~\mathrm{cm}^{-2}\,\mathrm{c}^{-1})$ можно выразить как

$$\eta_{\rm td} = \chi n_{\rm act} \widetilde{\sigma}_{\rm tot} N_{\rm ss} m_{\rm sp} k_{\rm td}, \qquad (3.5)$$

где χ — доля молекулы в ледяной мантии, $n_{\rm act}$ — число активно сублимирующих монослоёв и $\tilde{\sigma}_{\rm tot}$ (см² см⁻²) — суммарная площадь поверхности пылинок (крупных или мелких), приходящаяся на единицу площади диска.

Обычно считается, что свободно десорбируют 2–4 верхних слоя ледяной мантии. Учитывая, что в модели рассматриваются четыре молекулы со сравнимыми содержаниями, положим $\chi n_{\rm act} = 1$ во всём диске. Для плотности ячеек на поверхности пыли примем значение $N_{\rm ss} = 10^{15}$ см⁻², характерное для аморфного водяного льда [166]. Принятые энергии десорбции основаны на экспериментальных данных по сублимации с покрытых водяным льдом поверхностей [166].

Чтобы рассматривать лёд на двух отдельных населениях пыли, необходимо рассчитать суммарную площадь поверхности $\tilde{\sigma}_{tot}$ для этих населений ($\tilde{\sigma}_{tot}^{sm}$ и $\tilde{\sigma}_{tot}^{gr}$). Пусть пылинки распределены по размерам по степенному закону с наклоном p = -3.5, мелкая пыль имеет размеры от a_{min} до a_* , крупная — от a_* до a_{max} , и размер пыли не меняется в вертикальном направлении $a \neq a(z)$. Тогда площадь поверхности мелкой и крупной пыли выражается как

$$\widetilde{\sigma}_{\rm tot}^{\rm sm} = \frac{3\Sigma_{\rm d,sm}}{\rho_{\rm s}\sqrt{a_{\rm min}a_*}},\tag{3.6}$$

$$\widetilde{\sigma}_{\text{tot}}^{\text{gr}} = \frac{3\Sigma_{\text{d,gr}}}{\rho_{\text{s}}\sqrt{a_*a_{\text{max}}}},$$
(3.7)

где $\rho_{\rm s} = 3$ г см³ — плотность вещества пылинок, значение которой соответствует силикатной пыли.

3.2.2. Фотодесорбция

В прозрачных для излучения областях диска льды могут переходить в газовую фазу под действием фотодесорбции УФ фотонами звёздного и межзвёздного излучения. В характерных для диска условиях фотодесорбция обычно гораздо слабее тепловой десорбции благодаря относительно высоким температурам и поглощению УФ излучения имеющейся в изобилии пылью. Однако её влияние может быть существенным в холодных внешних областях диска и оболочке, где поверхностные плотности, в том числе пыли, ниже.

Коэффициент скорости реакции для фотодесорбци
и $k_{\rm pd}~({\rm c}^{-1})$ можно вычислить как

$$k_{\rm pd} = Y F_{\rm UV} \sigma_{\rm m}, \qquad (3.8)$$

где Y (молекул фотон⁻¹) — эффективность фотодесорбции, $F_{\rm UV}$ (фотон см⁻² с⁻¹) — поток УФ излучения, $\sigma_{\rm m}$ (см²) — типичное сечение поглощения молекулы в УФ.

Соответствующий темп фотодесорбции на единицу площади диска
 $\eta_{\rm pd}~({\rm r~cm^{-2}\,c^{-1}})$ равен

$$\eta_{\rm pd} = \chi n_{\rm act} \widetilde{\sigma}_{\rm tot} N_{\rm ss} m_{\rm sp} k_{\rm pd}. \tag{3.9}$$

Снова принимая $\chi n_{\rm act} = 1$ и аппроксимируя сечение молекулы как $\sigma_{\rm m} \approx N_{\rm ss}^{-1}$, получаем

$$\eta_{\rm pd} = \widetilde{\sigma}_{\rm tot} m_{\rm sp} Y F_{\rm UV}. \tag{3.10}$$

Будем считать эффективность фотодесорбции по экспериментальным данным для молекул воды $Y = 3.5 \times 10^{-3} + 0.13 \exp(-336/T)$ [167] (отметим, что в подписи к рисунку 3 в [167] есть опечатка в значении Y₀, см. также [168]). Это значение можно считать верхней границей экспериментально определённых эффективностей фотодесорбции [169]. Поток излучения $F_{\rm UV}$ удобно измерять в единицах стандартного УФ поля, $F_{\rm UV} = F_0^{\rm UV} G$, где безразмерный параметр G характеризует величину поля. Стандартная интенсивность межзвёздного излучения $I_0(E)$ (фотон см⁻² с⁻¹ ср⁻¹ эВ⁻¹) в зависимости от энергии фотонов E (эВ) приближённо описывается следующей формулой (см. уравнение 11 в [170])

$$I_0(E) = 1.658 \times 10^6 E - 2.152 \times 10^5 E^2 + 6.919 \times 10^3 E^3.$$
(3.11)

Соответствующая интегральная УФ интенсивность $I_0^{\rm UV}$ в диапазоне 6.2–13.6 эВ (912–2000 Å) равна

$$I_0^{\rm UV} = \int_{6.2}^{13.6} I_0(E) \, \mathrm{d}E = 1.474 \times 10^7 \text{ фотон } \mathrm{cm}^{-2} \, \mathrm{c}^{-1} \, \mathrm{cp}^{-1}. \tag{3.12}$$

Поток изотропного излучения, идущего с полусферы, через единицу поверхности $F_0^{\rm UV}$ равен

$$F_0^{\rm UV} = \pi I_0^{\rm UV} = 4.63 \times 10^7$$
фотон см⁻² с⁻¹. (3.13)

В данной работе в качестве источника фотодесорбции рассматривается межзвёздное УФ излучение, пронизывающее диск в вертикальном направлении. Возможный вклад центральной звезды не учитывается, поскольку влияние фотодесорбции важно только на внешнем краю диска, в области, которая заслонена от УФ излучения звезды самим диском.

Поскольку протопланетные диски рождаются в зонах звездообразования, примем слегка повышенное фоновое УФ поле $G_{\rm env} = 5.5G_0$. В плоскости диска, которая подсвечивается с двух сторон, это поле будет ослабляться с оптической толщиной диска в УФ $\tau_{\rm UV}$ следующим образом

$$G_{\rm UV} = 0.5 G_{\rm env} e^{-\tau_{\rm UV}}.$$
 (3.14)

Оптическая толщина рассчитывается из поверхностных плотностей крупной и мелкой пыли

$$\tau_{\rm UV} = 0.5 \left(\varkappa_{\rm sm} \Sigma_{\rm d,sm} + \varkappa_{\rm gr} \Sigma_{\rm d,gr} \right), \qquad (3.15)$$

где $\varkappa_{\rm sm} = 10^4 \,{\rm cm}^2 \,{\rm r}^{-1}$, $\varkappa_{\rm gr} = 2 \times 10^2 \,{\rm cm}^2 \,{\rm r}^{-1}$ — типичные значения коэффициентов непрозрачности для мелкой и крупной пыли в УФ (см. рисунок 1 в [171]). Фактор 0.5 в уравнении (3.14) отражает предположение о доминировании переноса излучения в вертикальном направлении, т.е. оптическая толщина в радиальном направлении много больше, чем в вертикальном.

3.2.3. Адсорбция

Темп адсорбции молекул λ (с⁻¹) на монодисперсную нейтральную пыль с радиусом a и концентрацией n вычисляется следующим образом [172]

$$\lambda = \pi a^2 n \sqrt{\frac{8k_{\rm B}T}{\pi m_{\rm sp}}}.$$
(3.16)

Для полидисперсного ансамбля пыли множитель $\pi a^2 n$ в уравнении (3.16) превратится в суммарное сечение пылевых частиц, приходящееся на единицу объёма, что можно выразить через множитель $\tilde{\sigma}_{tot}$ из уравнений (3.6) и (3.7):

$$\lambda = \frac{\widetilde{\sigma}_{\text{tot}}}{4} \sqrt{\frac{8k_{\text{B}}T}{\pi m_{\text{sp}}}}.$$
(3.17)

3.2.4. Тестирование модели

Система уравнений (3.1), (3.2), (3.3) имеет аналитическое решение. Пусть Σ_{0s}^{gas} , Σ_{0s}^{sm} и Σ_{0s}^{gr} — значения поверхностных плотностей в начальный момент времени. Тогда через время Δt их значения будут определяться следующими выражениями

$$\Sigma_s^{\text{gas}} = \Sigma_{0s}^{\text{gas}} + \left(\frac{\eta_s}{\lambda_s} - \Sigma_{0s}^{\text{gas}}\right) \left(1 - e^{-\lambda_s \Delta t}\right), \qquad (3.18)$$

$$\Sigma_s^{\rm sm} = \Sigma_{0s}^{\rm sm} + \frac{\lambda_s^{\rm sm}}{\lambda_s} \left(\Sigma_{0s}^{\rm gas} - \frac{\eta_s}{\lambda_s} \right) \left(1 - e^{-\lambda_s \Delta t} \right), \qquad (3.19)$$

$$\Sigma_s^{\rm gr} = \Sigma_{0s}^{\rm gr} + \frac{\lambda_s^{\rm gr}}{\lambda_s} \left(\Sigma_{0s}^{\rm gas} - \frac{\eta_s}{\lambda_s} \right) \left(1 - e^{-\lambda_s \Delta t} \right). \tag{3.20}$$

Здесь используется тот факт, что отношение между темпами адсорбции на разные населения пыли равно отношению суммарных площадей поверхности этих населений $\eta_s^{\rm sm}/\eta_s^{\rm gr} = \lambda_s^{\rm sm}/\lambda_s^{\rm gr} = \sigma_{\rm tot}^{\rm sm}/\sigma_{\rm tot}^{\rm gr}$. То же верно и для темпов десорбции.

Можно получить асимптотическое поведение этих решений. Из уравнения (3.18) видно, что $\Sigma_s^{\text{gas}} \to \eta_s/\lambda_s$ при $\Delta t \to \infty$. Тот же результат получается из уравнений (3.1), (3.2) и (3.3), если занулить их левые части, так как все отношения η_s/λ_s , $\eta_s^{\text{sm}}/\lambda_s^{\text{sm}}$ и $\eta_s^{\text{gr}}/\lambda_s^{\text{gr}}$ равны. Задавшись условием сохранения суммарного количества летучего соединения в трёх фазах, из уравнений (3.19) и (3.20) можно найти равновесные решения для льдов при $\Delta t \to \infty$: $\Sigma_s^{\text{gr}} = \Sigma_{0s}^{\text{gr}} + \lambda_s^{\text{gr}}/\lambda_s (\Sigma_{0s}^{\text{gas}} - \eta_s/\lambda_s)$ и $\Sigma_s^{\text{sm}} = \Sigma_{0s}^{\text{sm}} + \lambda_s^{\text{sm}}/\lambda_s (\Sigma_{0s}^{\text{gas}} - \eta_s/\lambda_s).$

При некоторых начальных условиях, которые реализуются в том числе в протопланетных дисках, может оказаться, что равновесная поверхностная плотность молекулы в газе η_s/λ_s превышает суммарное содержание этой молекулы во всех фазах $\Sigma_s^{\text{total}} = \Sigma_{0s}^{\text{gas}} + \Sigma_{0s}^{\text{sm}} + \Sigma_{0s}^{\text{gr}}$. Это следствие десорбции нулевого порядка, при которой темп десорбции не зависит от количества присутствующего льда. Формально такой подход допускает отрицательные поверхностные плотности льдов. Чтобы избежать этой несогласованности, модифицируем решение так, чтобы все поверхностные плотности были неотрицательными, а Σ_s^{gas} не превосходила суммарное содержание молекулы Σ_s^{total} . Если через время Δt поверхностная плотность



Рис. 3.3. Пример расчёта в одноточечной модели адсорбции/десорбции CO при разных начальных значениях поверхностной плотности. Поверхностная плотность CO в газе, на мелкой и на крупной пыли показана сплошной, пунктирной и штрих-пунктирной чёрными линиями. Серая штриховая линия обозначает суммарное содержание CO во всех трёх фазах $\Sigma_{\rm CO}^{\rm total}$, красной линией показано равновесное содержание в газовой фазе $\eta_{\rm CO}/\lambda_{\rm CO}$. Поверхностная плотность пыли равна $\Sigma_{\rm d,sm} = \Sigma_{\rm d,gr} = 10^{-4} \, \Gamma \, {\rm cm}^{-2}$ на трёх верхних и $1 \, \Gamma \, {\rm cm}^{-2}$ на трёх нижних рисунках.

льда на любом из населений пыли становится ниже очень малого положительного значения $\epsilon_{\text{tiny}} = 10^{-15} \Sigma_s^{\text{total}}$, то она приравнивается к ϵ_{tiny} , а количество льда на втором населении находится из условия сохранения Σ_s^{total} . Если содержания обеих ледяных компонент падают ниже ϵ_{tiny} , то они обе приравниваются к ϵ_{tiny} , а содержание в газе становится равным Σ_s^{total} .

Продемонстрируем результаты применения данного подхода. На рисунке 3.3 показана эволюция трёх компонент поверхностной плотности молекулы СО при разных начальных значениях её поверхностной плотности в разных фазах. В моделях на рисунке 3.3 фотодесорбция не учитывается, показан эффект исключительно тепловой десорбции. Температура прини-

104

мается равной 21 К, $a_{\min} = 5 \times 10^{-7}$ см, $a_* = 10^{-4}$ см, $a_{\max} = 10^{-3}$ см, что соответствует начавшей эволюционировать пыли. Также шкала высот принималась равной h = 1 а.е., а поверхностные плотности мелкой и крупной пыли $\Sigma_{d,sm} = \Sigma_{d,gr} = 10^{-4}$ и 1 г см⁻², что типично для внешних и внутренних областей диска, соответственно. Энергия десорбции и молекулярная масса брались для молекулы CO; предполагалось, что $\Sigma_{CO}^{total} = 0.1\Sigma_{d,tot}$ (см. таблицу 3.1).

Модели с разными значениями $\Sigma_{d,sm}$, показанные на верхних и нижних панелях на рисунке 3.3, отличаются соотношением между Σ_{CO}^{total} и равновесной поверхностной плотностью газофазного CO: $\Sigma_{CO}^{total} < \eta_{CO}/\lambda_{CO}$ при $\Sigma_{d,sm} = 10^{-4} \,\Gamma \,\mathrm{cm}^{-2}$ и $\Sigma_{CO}^{total} > \eta_{CO}/\lambda_{CO}$ при $\Sigma_{d,sm} = 1 \,\Gamma \,\mathrm{cm}^{-2}$. Эти случаи описывают, соответственно, разреженный газ, в котором летучие в основном находятся в газовой фазе, и плотный газ, где происходит вымерзание. Можно сказать, что в первом случае принятая температура 21 K выше температуры вымерзания, а во втором — ниже.

На верхних панелях рисунка 3.3 показаны результаты для газа с содержанием СО ниже равновесного $\Sigma_{\rm CO}^{\rm total} < \eta_{\rm CO}/\lambda_{\rm CO}$. В этом случае льды полностью переходят в газовую фазу, а газофазное содержание стремится дорасти до равновесного, что невозможно из-за недостатка СО. Временные шкалы десорбции отдельно с мелкой и крупной пыли одинаковы, поскольку определяются одинаковым показателем степени в уравнениях (3.19) и (3.20). Когда присутствуют оба населения пыли, лёд быстрее сублимирует с мелкой пыли, так как его поверхностная плотность пропорциональна $\lambda_{\rm CO}^{\rm sm}$, то есть суммарной площади поверхности мелкой пыли, которая обычно больше, чем у крупной. При значительном росте пыли в протопланетных дисках может наступать обратная ситуация, площадь крупной пыли превысит площадь мелкой, в таком случае темп десорбции будет выше с крупной пыли. Если полное содержание молекулы выше, чем $\eta_{\rm CO}/\lambda_{\rm CO}$, то в зависимости от начальных условий возможны различные соотношения



Рис. 3.4. Сравнение расчётов с учётом фотодесорбции (зелёные линии) и без учёта фотодесорбции (синие линии). Шкала высот h = 10 а.е., температура 15 K, поверхностные плотности мелкой и крупной пыли равны 10^{-4} г см⁻².

между Σ_{CO}^{sm} и Σ_{CO}^{gr} , что демонстрируют нижние панели рисунка 3.3.

Характерные времена замерзания и сублимации определяются суммарным темпом десорбции с обоих населений пыли λ_{CO} . В примерах, показанных на рисунке 3.3, они варьируются от дней до лет, что короче типичных динамических времён в протопланетном диске. В более холодной разреженной среде временные шкалы могут достигать сотен лет, в то время как в тёплых плотных областях они не превышают минут.

На рисунке 3.4 показаны тестовые решения для СО в одноточечной модели с учётом и без учёта фотодесорбции. Представлены примеры разных начальных содержаний. Выбраны условия, при которых эффект фотодесорбции существенен — низкая температура и поверхностная плотность. В более горячих и плотных участках диска фотодесорбция незаметна по сравнению с тепловой десорбцией. Её влияние проявляется только в разреженных внешних областях оболочки диска. Проведённые тесты показывают устойчивость и физичность численного решения в широком диапазоне начальных условий.

3.3. Динамическая модель диска с летучими соединениями

Из-за продолжительного времени эволюции диска, широкого диапазона физических условий и пространственных масштабов полные трёхмерные модели диска требуют больших вычислительных ресурсов. В них сложно включить дополнительные физические процессы, поэтому для детального изучения последних обычно используют одномерные модели на основе модели Прингла [173]. Преимущество двумерного моделирования (в плоскости r, ϕ) состоит в том, что оно описывает полную систему уравнений гидродинамики, будучи менее затратным с точки зрения вычислений по сравнению с трехмерными моделями, поэтому позволяет рассмотреть на длинных временных шкалах дополнительные процессы, такие как эволюция и динамика пыли и летучих соединений.

Описанная в предыдущем разделе модель фазовых превращений была добавлена в двумерный гидродинамический код FEOSAD с эволюцией пыли [19]. Он позволяет рассматривать эволюцию самогравитирующего тонкого протозвёздного диска с момента начала сжатия облака до формирования диска и стадии T Тельца, когда большая часть вещества уже аккрецировала на сформировавшуюся протозвезду.

Поверхностные плотности каждой молекулы могут меняться под действием трёх основных физических процессов. Во-первых, вещество может переходить из газовой в ледяную фазу и обратно вследствие адсорбции и десорбции (см. раздел 3.2). Во-вторых, благодаря коагуляции и фрагментации может происходить обмен ледяными мантиями между крупными и мелкими пылинками (см. раздел 3.3.2). В-третьих, летучие соединения участвуют в адвекции вещества, они движутся вместе с газом и соответствующей популяцией пыли.

Наличие ледяных мантий на пыли также может влиять на её эволюцию. Учёт этого влияния через изменение скорости фрагментации описан

Таблица 3.1. Энергии десорбции, молекулярные массы и начальные содержания рассмотренных летучих соединений. Энергии десорбции для H_2O , CO_2 и CO основаны на экспериментальных данных из работы [166] для десорбции с кристаллического водяного льда, энергия десорбции метана взята из работы [48]. Начальные содержания летучих по отношению к газу $\Sigma_s^{\rm sm}/\Sigma_g^{\rm init}$ основаны на содержаниях льдов относительно водяного льда $f_{\rm ice}$, определённых для маломассивных протозвёзд [174].

Молекула	$E_{\rm b}/k_{\rm B}$	$m_{ m sp}$	$f_{\rm ice}$	$\Sigma_s^{\rm sm}/\Sigma_{\rm g}^{\rm init}$
	(K)	(а.е.м.)	(%)	
H_2O	5770	18	100	3.90×10^{-4}
$\rm CO_2$	2360	44	29	2.77×10^{-4}
CO	850	28	29	1.76×10^{-4}
CH_4	1100	16	5	1.74×10^{-5}

в разделе 3.3.3. Кроме того, была скорректирована модель роста пылинок в FEOSAD. Обновлённая модель описана в разделе 3.3.1.

В данной работе рассматриваются четыре наиболее распространённых летучих молекулы: вода, угарный газ, углекислый газ и метан. Химические реакции в газе и на поверхности пыли не учитываются. Предполагается, что в исходном облаке все летучие соединения находятся на поверхности мелкой пыли. Начальные содержания летучих в модели опираются на содержания льдов, наблюдавшиеся телескопом *Spitzer* в протозвёздных ядрах [174]. Принятые отношения их поверхностной плотности к поверхностной плотности газа (Σ_{g}^{init}) представлены в таблице 3.1 наряду с другими параметрами молекул.

По некоторым оценкам суммарная масса льдов в протопланетных дисках сравнима с массой ядер пылинок [107], однако в данной работе полная масса льда принимается на основе [174], что на порядок величины ниже. Это позволяет предполагать, что толщина ледяных мантий мала по сравнению с размером пылинки, и наличие мантии не влияет на динамику пыли. В начальный момент времени суммарная поверхностная плотность летучих составляет всего около 8.6% от поверхностной плотности пыли,
поэтому вклад мантии в размер и массу пылинки незначителен. Подробнее этот вопрос обсуждается в разделе 3.5.

В данной работе рассматривается два значения параметра турбулентности α , 10^{-2} и 10^{-4} , которые соответствуют дискам с развитой и подавленной магнито-вращательной неустойчивостью [175].

Температуры газа и пыли считаются равными и вычисляются из теплового баланса с учётом нагрева излучением звезды и фоновым межзвёздным излучением, радиативного охлаждения пыли, а также вязкого и адиабатического нагрева [19]. Изначально коллапсирующее ядро имеет температуру $T_{\rm init} = 15$ K и массу 0.66 M_{\odot} , масса пыли составляет 0.01 от массы газа.

Расчёты производятся на сетке с полярными координатами (r, ϕ) с разрешением 256 × 256 ячеек, сетка по радиусу логарифмическая, по азимутальному углу равномерная. Размер ячеек составляет 0.029, 0.35 и 3.5 а.е. на внутренней границе диска (0.8 а.е.), на 10 и на 100 а.е., соответственно. Центральная область радиусом 0.8 а.е. заменяется на поглощающую ячейку. На границе с поглощающей ячейкой применяются граничные условия со свободным втеканием-вытеканием, чтобы минимизировать влияние границы на динамику газа и пыли.

3.3.1. Модификация модели роста пыли

В данном разделе описана принятая в коде FEOSAD модель пыли и её эволюции [19], а также внесённые в неё изменения. Населения крупной и мелкой пыли в модели описываются, соответственно, поверхностными плотностями $\Sigma_{d,gr}$ и $\Sigma_{d,sm}$. Каждое из них представляет собой ансамбль пылинок разного размера с распределением N(a), которое описывается степенным законом $N(a) = Ca^{-p}$ с фиксированным показателем степени p = 3.5 и нормировочной константой C, определяющейся поверхностной плотностью пыли. Размер мелкой пыли меняется от $a_{\min} = 5 \times 10^{-7}$ см до $a_* = 10^{-4}$ см. Размер крупной пыли меняется от a_* до некоторого максимального a_{max} , который может быть разным в разных точках диска и меняется со временем вследствие коагуляции и фрагментации пыли, а также динамики пылинок в диске.

Важным процессом, ограничивающим рост пыли, является фрагментация. В данной точке диска размер пыли a_{max} не может превышать значение, заданное фрагментационным барьером роста пыли [71]

$$a_{\rm frag} = \frac{2\Sigma_{\rm g} v_{\rm frag}^2}{3\pi\rho_{\rm s}\alpha c_{\rm s}^2},\tag{3.21}$$

где $v_{\rm frag}$ — скорость фрагментации (см. раздел 3.3.3). Кроме фрагментации размер может быть ограничен радиальным дрейфом, а также темпом коагуляции.

Одним из шагов в расчёте эволюции пыли является перераспределение вещества между населениями пыли в соответствии с поверхностными плотностями пыли, обновлёнными после шага адвекции. Адвекция может привести к возникновению разрыва в распределении по размерам между населениями пыли на $a = a_*$. Также шаг эволюции пыли даёт обновлённое значение a_{max} , поэтому необходимо скорректировать распределение пылинок по размерам в соответствии с этим значением — перенести часть мелкой пыли в разряд крупной или наоборот.

Изменение поверхностной плотности мелкой пыли вследствие её перехода в крупную пыль $\Delta \Sigma_{\rm d,sm} = \Sigma_{\rm d,sm}^{n+1} - \Sigma_{\rm d,sm}^n$ выражается как

$$\Delta \Sigma_{\rm d,sm} = \Sigma_{\rm d,tot}^n \frac{I_1 \left(C_{\rm sm}^{n+1} C_{\rm gr}^n I_2 - C_{\rm sm}^n C_{\rm gr}^{n+1} I_3 \right)}{\left(C_{\rm sm}^{n+1} I_1 + C_{\rm gr}^{n+1} I_3 \right) \left(C_{\rm sm}^n I_1 + C_{\rm gr}^n I_2 \right)},\tag{3.22}$$

где $\Sigma_{d,tot}^n = \Sigma_{d,sm}^n + \Sigma_{d,gr}^n$ — суммарная поверхностная плотность пыли, C_{sm} и C_{gr} — нормировочные константы для распределений мелкой и крупной пыли по размерам на текущем (n) и последующем (n+1) временном шаге,



Рис. 3.5. Распределение пыли по размерам до шага эволюции пыли (красные линии) и после (синие линии). Голубым цветом показан (положительный или отрицательный) прирост в поверхностной плотности мелкой пыли $\Delta \Sigma_{d,sm}$, жёлтым и оранжевым — приход или уход крупной пыли, соответственно. Приведены примеры разной величины разрыва между мелкой и крупной пылью: в пользу мелкой пыли (слева), без разрыва (в центре), в пользу крупной пыли (справа). Показаны только случаи с оf $a_{max}^{n+1} > a_{max}^{n}$.

а интегралы I_1, I_2 и I_3 определяются как

$$I_1 = \int_{a_{\min}}^{a_*} a^{3-p} da, \quad I_2 = \int_{a_*}^{a_{\max}^n} a^{3-p} da, \quad I_3 = \int_{a_*}^{a_{\max}^{n+1}} a^{3-p} da.$$
(3.23)

В предыдущей версии модели [19] в распределении пылинок по размерам мог возникать разрыв на $a = a_*$. В качестве модификации было добавлено предположение о сохранении неразрывного распределения пыли. Как и ранее, в модели также предполагается, что суммарное количество пыли сохраняется, а наклон в распределении поверхностной плотности остаётся постоянным.

Изменение распределения пыли по размерам в модифицированной модели роста пыли проиллюстрировано на рисунке 3.5. Красными и синими линиями показаны распределения пыли по размерам на *n*-ом и (n+1)-ом временном шаге, соответственно. Голубым закрашена та часть мелкой пыли, которая переходит в крупную пыль за один гидродинамический шаг по времени. Закрашенная оранжевым часть крупной пыли также переходит в область бо́льших размеров $a > a_{\text{max}}^n$, но этот переход не влияет на суммарное количество крупной пыли.

3.3.2. Обмен ледяными мантиями при эволюции пыли

Мелкая и крупная пыль могут переходить одна в другую, и их ледяные мантии при этом должны также перемещаться с одного населения пыли на другое. В данной модели предполагается, что льды перераспределяются пропорционально массе пыли. Если некоторая массовая доля мелкой пыли превратилась в крупную, то такая же доля каждого из льдов на мелкой пыли переходит в соответствующий лёд на крупной пыли.

Поверхностные плотности молекул $\Sigma_{s,n+1}^{sm}$ и $\Sigma_{s,n+1}^{gr}$ в момент времени n+1, связаны с их поверхностными плотностями $\Sigma_{s,n}^{sm}$ и $\Sigma_{s,n}^{gr}$ в момент n следующими соотношениями:

$$\Sigma_{s,n+1}^{\rm sm} = \Sigma_{s,n}^{\rm sm} + \Delta \Sigma_{\rm d,sm} A_s, \qquad (3.24)$$

$$\Sigma_{s,n+1}^{\rm gr} = \Sigma_{s,n}^{\rm gr} - \Delta \Sigma_{\rm d,sm} A_s, \qquad (3.25)$$

где $\Delta \Sigma_{d,sm}$ определяется из модели роста пыли (уравнение 3.22). Здесь A_s — массовая доля выбранного льда, которая должна быть перенесена на другую пылевую компоненту:

$$A_{s} = \begin{cases} \Sigma_{s,n}^{\rm sm} / \Sigma_{\rm d,sm}^{n}, & \text{если } \Delta \Sigma_{\rm d,sm} < 0; \\ \Sigma_{s,n}^{\rm gr} / \Sigma_{\rm d,gr}^{n}, & \text{если } \Delta \Sigma_{\rm d,sm} \ge 0. \end{cases}$$
(3.26)

3.3.3. Влияние ледяных мантий на фрагментацию пыли

Влияние ледяных мантий на эволюцию пыли описывается в терминах скорости фрагментации $v_{\rm frag}$, значение которой меняется в зависимости от наличия льда на поверхности крупной пыли. В заданной точке диска на каждом временном шаге новое значение $v_{\rm frag}$ рассчитывается после вычисления поверхностных плотностей летучих соединений, изменившихся под влиянием адвекции, фазовых превращений и эволюции пыли. Оно затем

используется для вычисления параметров локального пылевого ансамбля (см. уравнение (3.21)).

Согласно лабораторным исследованиям, наличие у пылинок ледяных мантий помогает преодолеть фрагментационный барьер за счёт повышения их v_{frag} [155,156,176]. При этом есть работы, где показано, что водяной лёд необязательно способствует слипаемости пылинок и их устойчивости к фрагментации [177]. В рамках данного исследования будем считать, что присутствие ледяной мантии любого химического состава увеличивает скорость фрагментации.

Для задания v_{frag} необходимо определить, достаточно ли суммарного количества льда на крупных пылинках, чтобы покрыть их хотя бы одним слоем ледяной мантии. Если это так, то пыль считается обледеневшей и имеет высокую скорость фрагментации, в противном случае пылинки считаются сухими и более хрупкими, с низкой скоростью фрагментации.

Суммарная поверхностная плотность четырёх льдов на крупной пыли выражается как $\Sigma_{ice} = \sum_{s=1}^{4} \Sigma_s^{gr}$. Значение v_{frag} определяется в зависимости от того, превосходит ли отношение $\Sigma_{ice}/\Sigma_{d,gr}$ некоторое пороговое значение K. Чтобы определить K, вычислим Σ_{ice}^{min} — минимальную поверхностную плотность льда на крупной пыли, достаточную, чтобы покрыть крупную пыль одослойной мантией. Средний размер крупной пыли равен $\overline{a_{gr}} = \sqrt{a_* a_{max}}$. Если считать, что толщина монослоя примерно равна размеру молекулы воды $a_{ml} = 3 \times 10^{-8}$ см, а плотности льда и тугоплавкого ядра пылинки равны $\rho_{ice} = 1 \, \Gamma \, \mathrm{cm}^{-3}$ и $\rho_{s} = 3 \, \Gamma \, \mathrm{cm}^{-3}$, соответственно, получим

$$K = \frac{\Sigma_{\rm ice}^{\rm min}}{\Sigma_{\rm d,gr}} = \frac{4\pi \overline{a_{\rm gr}}^2 a_{\rm ml} \rho_{\rm ice}}{4/3\pi \overline{a_{\rm gr}}^3 \rho_{\rm s}} = \frac{3a_{\rm ml} \rho_{\rm ice}}{\overline{a_{\rm gr}} \rho_{\rm s}} = \frac{3 \times 10^{-8} \rm cm}{\sqrt{a_* a_{\rm max}}}.$$
 (3.27)

Для пыли с $a_* = 10^{-4}$ см и $a_{\text{max}} = 10^{-2}$ см получим $K = 3 \times 10^{-5}$. Видно, что для существования однослойной мантии достаточно очень небольшого относительного количества льда.

Значения скорости фрагментации для сухих и обледеневших пылинок выбраны на основе экспериментальных данных и теоретического моделирования [155, 176]:

$$v_{\rm frag} = \begin{cases} 15 \,\mathrm{m} \,\mathrm{c}^{-1}, & \text{если } \Sigma_{\rm ice} / \Sigma_{\rm d,gr} > K; \\ 1.5 \,\mathrm{m} \,\mathrm{c}^{-1}, & \text{если } \Sigma_{\rm ice} / \Sigma_{\rm d,gr} \leqslant K. \end{cases}$$
(3.28)

3.4. Глобальная структура диска

Отличительной особенностью кода FEOSAD является возможность расчёта долговременной эволюции протопланетного диска. Модель стартует с коллапса ядра и формирования гравитационно неустойчивого диска и к моменту 0.5 млн лет приходит к почти осесимметричному диску, что соответствует молодому звёздному объекту класса II. В данном разделе обсуждаются основные особенности распределений газа и пыли в моделях, важные для дальнейшего описания эволюции летучих соединений.

На рисунках 3.6 и 3.7 представлены временные диаграммы, которые демонстрируют изменение во времени азимутально усреднённых параметров газа и пыли в двух моделях с разными значениями α . Диск формируется через ≈ 50 тыс. лет после начала коллапса и в течение последующих 450 тыс. лет вязко растекается наружу, теряет массу из-за аккреции на звезду и остывает. На ранних этапах (до 200 тыс. лет) наблюдаются кратковременные вспышки, нагревающие диск, они особенно заметны в модели с $\alpha = 10^{-2}$. Разреженные области за пределами ~200 а.е. представляют собой оболочку диска, из которой в него поступает вещество на ранних стадиях эволюции. Из-за редкости столкновений между частицами пыль в оболочке не вырастает крупнее 10^{-4} см, и число Стокса, которое характеризует степень динамической связанности пылевых частиц с газом, высоко из-за низкой плотности газа. Высокие значения числа Стокса (St > 1) соответствуют слабому влиянию газа на движение пыли, хотя уже при $St > 10^{-3}$



Рис. 3.6. Эволюция азимутально усреднённых радиальных распределений параметров газа и пыли в модели с $\alpha = 10^{-2}$. На панелях показаны: поверхностная плотность газа (а), крупной пыли (b), мелкой пыли (c), максимальный размер пыли (d), соотношение масс пыли и газа (e), логарифм температуры (f), размер пыли по отношению к фрагментационному барьеру (g), число Стокса (h), эффективный α -параметр, связанный с гравитационной неустойчивостью (i). Белая сплошная линия очерчивает условную границу диска $\Sigma_{\rm g} = 1 \, {\rm r} \, {\rm cm}^{-2}$, голубой штриховой линией показана «тепловая» линия льдов воды (см. раздел 3.5.1). Чёрным контуром на панели (g) очерчена область, где размер пыли определяется фрагментацией.

движение пыли относительно газа становится заметным.

В самом диске, где столкновения происходят часто, пыль вырастает до сантиметровых размеров, а в модели с $\alpha = 10^{-4}$ даже до нескольких дециметров. Крупная пыль дрейфует к звезде в соответствии с классическим описанием радиального дрейфа [178]. Когда поток мелкой пыли из оболочки иссякает (после 300 тыс. лет), это приводит к уменьшению доли пыли во внешнем диске до 10^{-3} и ниже. Размер пыли увеличивается по направлению к звезде в основном объёме диска за исключением внутренней области с эффективной фрагментацией.

Однако внутри ≈ 10 а.е. количество и крупной, и мелкой пыли по отношению к газу выше, чем в остальном диске. В моделях с разным α это



Рис. 3.7. То же, что и на рисунке 3.6, но для модели с $\alpha = 10^{-4}$.

вызвано разными механизмами. При высокой турбулентности основным фактором является понижение числа Стокса и, как следствие, скорости дрейфа из-за уменьшения размера пыли, вызванного понижением v_{frag} . При низкой турбулентности во внутреннем диске присутствует мёртвая зона, в которой формируются пылевые кольца.

В модели с $\alpha = 10^{-2}$ хорошо видно, как на свойства пыли влияет классическая линия льдов воды, положение которой задаётся тепловой десорбцией и градиентом температуры в диске (см. также раздел. 3.5.1). Внутри этой линии массовая доля пыли повышена в несколько раз, а максимальный размер пыли понижен на два порядка, количество мелкой пыли сравнимо с крупной, в отличие от внешних областей, где оно ниже примерно на два порядка. Это изменение — следствие падения скорости фрагментации до $v_{\rm frag} = 1.5 \,{\rm m}\,{\rm c}^{-1}$, которое вызвано сублимацией ледяных мантий в тёплых внутренних участках диска. Стократная разница в размере пыли по разные стороны от линии льдов напрямую следует из десятикратного изменения в $v_{\rm frag}$ (см. уравнения (3.21) и (3.28)). Из-за более эффективной фрагментации уменьшается размер пыли, и она дрейфует гораздо медленнее. Кроме того, образуется много мелкой пыли, которая дрейфу не подвержена. Оба этих фактора способствуют накоплению пыли.

Влияние ледяных мантий значительно в модели с $\alpha = 10^{-2}$, поскольку в ней именно столкновительная фрагментация ограничивает рост пыли. Как видно из рисунка 3.6 (g), максимальный размер пыли в значительной части диска равен размеру $a_{\rm frag}$, который продиктован фрагментационным барьером. В модели с на два порядка более низкой турбулентностью $a_{\rm frag}$ на два порядка выше, как следует из уравнения (3.21). Поэтому размер пыли определяется фрагментацией в ме́ньшей части диска — только там, где $v_{\rm frag}$ понижена из-за отсутствия ледяных мантий (см. рисунок 3.7 (g)). В остальных участках диска рост пыли ограничен радиальным дрейфом. Аналогичным образом, в работе [153] влияние линии льдов СО на рост пыли не проявляется в модели из-за определяющей роли радиального дрейфа.

В модели с $\alpha = 10^{-4}$ размер пыли не испытывает резкого изменения на линии льдов воды, так как граница между областями влияния фрагментации и радиального дрейфа лежит не на линии льдов, а несколько ближе к звезде, особенно на ранних временах. Хотя переход от дрейфа к фрагментации также приводит к изменению свойств пыли, оно здесь не такое резкое и происходит не в точности на линии льдов (ср. чёрный контур на рисунке 3.7(g) с кольцами внутри 10 а.е. на рисунках 3.7 (b), (c) и (e)). Кроме того, линия льдов влияет на число Стокса (рисунок 3.7 (h)) и очерчивает внутренние кольца на более поздних временах.

Одно из отличий между моделями с $\alpha = 10^{-2}$ и $\alpha = 10^{-4}$ состоит в том, насколько в них выражена гравитационная неустойчивость, которая проявляется в формировании спиралей и сгустков. В модели с высокой турбулентностью ($\alpha = 10^{-2}$) диск растекается быстрее, поэтому он больше по размеру. Также в нём эффективнее вязкий нагрев, и диск горячее, особенно во внутренних областях. Кроме того, в модели с $\alpha = 10^{-4}$ во внутреннем диске понижен эффективный параметр турбулентности $\alpha_{\text{eff}} = \alpha + \alpha_{\text{GI}}$, где α_{GI} — параметр вязкости, связанный с самогравитацией, [179] (см. рисунки 3.6 (i) и 3.7 (i)).

В обеих моделях образующиеся диски очень массивны (около 0.2 M_{\odot} на 500 тыс. лет) и гравитационно неустойчивы, в обеих образуются спирали. Но массивные сгустки появляются и живут дольше сотен лет только в модели с $\alpha = 10^{-2}$. Для их возникновения кроме гравитационной неустойчивости и выполнения критерия Тоомре [180] требуется, чтобы сжимающееся под собственным весом вещество охлаждалось достаточно быстро [181]. Это условие выполняется обычно на больших расстояниях от звезды $\gtrsim 100$ а.е. [182]. На тех стадиях, когда плотность в диске ещё достаточно высока, в модели с $\alpha = 10^{-4}$ диск ещё слишком компактный из-за низкой турбулентности. В результате подходящие условия возникают только в модели с $\alpha = 10^{-2}$.

Результаты, полученные для газа и пыли, интересны сами по себе и заслуживают отдельного рассмотрения. Однако данная работа нацелена на анализ летучих соединений. Свойства возникающих пылевых колец и особенности динамики газа и пыли в моделях выходят за рамки данной диссертационной работы, подробнее их анализ изложен в [A3].

3.5. Распределение и динамика летучих соединений

В данном разделе рассматривается распределение летучих по диску, положение их линий льдов и эффекты, возникающие на линиях льдов вследствие динамики газа и пыли.

Все четыре рассмотренных молекулы в газе и на поверхности мелкой и крупной пыли показаны на рисунках 3.8 и 3.9 для моделей с разным α-параметром. Поверхностные плотности летучих нормированы на поверхностные плотности соответствующих компонент: газофазные молекулы на Σ_{gas}, ледяные — на Σ_{d,sm} или Σ_{d,gr}.



Рис. 3.8. Эволюция азимутально усреднённых распределений четырёх рассмотренных молекул в газовой и ледяных фазах для модели с $\alpha = 10^{-2}$. Для каждой молекулы голубой штриховой линией показаны положения равновесных линий льдов. Белой пунктирной линией обозначена граница, на которой коэффициент экранирования СО равен 0.1. Чёрной штриховкой показана область влияния фотодиссоциации.

На рисунках 3.8 и 3.9 видно, что содержание летучих во всех фазах заметно варьируется по диску. Основные особенности этих распределений, связанные как с переносом летучих по диску, так и с взаимодействием между фазами, обсуждаются в последующих разделах.

3.5.1. Линии льдов

Линия льдов отделяет область диска, где летучее соединение находится в ледяной фазе, от области, где оно преимущественно газообразно. Сделать качественную оценку положения линии льдов можно по примерному значению температуры сублимации, однако существуют более деталь-



Рис. 3.9. То же, что и на рисунке 3.8, но для модели с $\alpha = 10^{-4}$.

ные подходы. К ним относится сравнение темпов адсорбции и десорбции молекулы, её содержаний в газовой и ледяной фазах или парциального давления молекулы в газовой фазе с её давлением насыщенного пара.

Учесть зависимость температуры вымерзания от давления позволяет, например, метод, описанный в работе [88]. Предполагается, что на линии льдов газовая и ледяная фазы находятся в динамическом равновесии и темпы адсорбции и десорбции молекулы равны между собой. Используя уравнения 7–8 из [88] для характерных значений концентрации газа и параметров пыли, можно рассчитать долю частиц, содержащихся в газовой фазе. Эта величина показана на рисунке 3.10 в зависимости от температуры и плотности газа для четырёх рассмотренных в модели молекул. При расчётах использовались значения энергии десорбции 5700 K (H₂O), 2580 K (CO₂), 1300 K (CH₄) и 1150 K (CO) и плотность активных центров



Рис. 3.10. Равновесная доля различных молекул в газовой фазе в зависимости от концентрации и температуры газа.

 $N_{\rm ss} = 4 \times 10^{14} \, {\rm cm}^2.$

Даже в предположении о стационарном процессе адсорбции и десорбции температура вымерзания сильно меняется в зависимости от плотности вещества. В осесимметричном протопланетном диске с монотонным падением температуры при удалении от звезды линия льдов даже с учётом этой зависимости будет иметь форму окружности с некоторым радиусом. Однако при возникновении двумерных структур в распределении плотности и/или радиальных вариаций температуры форма линии льдов будет сложнее. Ещё сильнее её может исказить нестационарность адсорбции и десорбции в сочетании с динамикой пыли и газа в диске [145, 146].

Чтобы определить положения линий льдов для расчитанных распределений летучих и оценить вклад динамических процессов в эти распределения, воспользуемся определением линий льдов через сравнение содержаний в газовой и ледяной фазах. Решение уравнений (3.1)–(3.3) при $\Delta t \rightarrow \infty$ (см. раздел 3.2.4) для фиксированных распределений газа и пыли в некоторый момент времени будут представлять собой стационарное решение для распределения летучих по диску. Это равносильно предположению, что характерные времена адсорбции и десорбции много меньше, чем локальные динамические времена. Определим «равновесную линию льдов» как совокупность точек в пространстве, где поверхностная плотность молекулы в газовой фазе равна сумме её поверхностных плотностей в ледяных фазах при $\Delta t \rightarrow \infty$. Сравнение с такой линией льдов позволит выделить влияние адвекции и немгновенности фазовых переходов на динамику летучих.

Равновесные линии льдов на рисунках 3.8 и 3.9 показаны голубыми штриховыми линиями. Для каждой молекулы выделяются по крайней мере две равновесные линии льдов: одна возникает вследствие тепловой десорбции, другая — фотодесорбции на периферии диска. Для удобства будем в дальнейшем называть их соответственно «тепловой линией льдов» и «фотолинией льдов». В некоторых случаях тепловых линий льдов может быть несколько вследствие немонотонности вариаций температуры и плотности с радиусом (см. H₂O и CO₂ на рисунке 3.9).

Тепловые линии льдов со временем сдвигаются ближе к звезде, поскольку диск постепенно остывает за счёт снижения темпа аккреции и аккреционной светимости, а также ослабления вязкого нагрева вследствие уменьшения плотности (см., например, [144]). Фотолинии льдов при этом примерно сохраняют своё положение. Они несколько смещаются в течение первых 300 тыс. лет, когда во внешнем диске заметно варьируются поверхностные плотности пыли, регулирующие УФ поле в плоскости диска. Когда поток пыли из оболочки в диск стабилизируется, фотолинии льдов перестают перемещаться.

Несмотря на то, что летучие в модели необязательно находятся в равновесии между фазами, их распределения довольно близко описываются равновесными линиями льдов, особенно у H₂O, CO₂ и CH₄. Несовпадение связано с динамикой вещества, в том числе с радиальным дрейфом пыли [145, 146]. Только для CO равновесные линии льдов существенно сдвинуты относительно рассчитанных распределений. Поскольку это самая летучая из рассмотренных молекул, линии льдов CO находятся на периферии диска, почти в оболочке, где плотности и температуры ниже, а характерные времена адсорбции и десорбции дольше, поэтому CO дальше от равновесия, чем другие молекулы.

Однако в определённые моменты и другие молекулы в результате переноса летучих находятся по обе стороны от линии льдов и в ледяной, и в газовой фазе. На временах до 200 тыс. лет газофазные молекулы можно найти на расстояниях до десятков а.е. дальше от звезды, чем их равновесная тепловая линия льдов, хотя их содержание там на порядок ниже. В случае тепловой линии льдов это объясняется наличием спиральных рукавов, в которых линия льдов простирается гораздо дальше, что подробнее обсуждается в разделе 3.5.4.

Во внешних областях межзвёздный УФ может не только фотодесорбировать молекулы с поверхности пыли, но и фотодиссоциировать их в газовой фазе. Этот эффект не учтён в динамической модели, однако можно качественно оценить его влияние апостериори. Для H_2O , CO_2 и CH_4 , темпы фотодесорбции которых сравнимы с темпом фотодиссоциации, содержание за пределами фотолинии льдов может быть ниже, чем представлено на рисунках 3.8 и 3.9. В заштрихованных областях за пределами фотолиний льдов молекулы в газовой фазе могут отсутствовать из-за фотодиссоциации.

Для СО, который подвержен экранированию [183], в первую очередь молекулой H₂, фотодиссоциация менее эффективна. Чтобы учесть эффект экранирования, белой пунктирной линией на рисунках 3.8 и 3.9 показано положение, соответствующее $\theta = 0.1$, где θ — фактор экранирования из [183]. Внутри этой линии СО вполне может быть устойчивым к фотодиссоциации. Молекулы в ледяной фазе тоже могут фотодиссоциировать, однако соответствующие темпы реакций должны быть ниже, чем в газовой фазе [169].

3.5.2. Влияние вспышек светимости

В гравитационно неустойчивом диске на ранней стадии эволюции эпизодически происходит резкое повышение темпа аккреции вещества на звезду [184]. Именно из-за таких вспышек аккреции на тепловых линиях льдов (в особенности CO₂, см. рисунок 3.8) возникают локальные пики на временах $\approx 120-220$ тыс. лет. В представленных моделях темп аккреции во время вспышек составляет $\sim 10^{-6} M_{\odot}$ год⁻¹, аккреционная светимость увеличивается в несколько раз и достигает 10–20 L_{\odot} . В модели с $\alpha = 10^{-2}$, для которой за счёт высокой вязкости характерна в целом более эффективная аккреция, амплитуда вспышек выше, чем в модели с $\alpha = 10^{-4}$.

В отсутствие вспышек льды находятся в основном на крупной пыли, которая благодаря коагуляции в целом доминирует по массе над мелкой. Сублимированные вспышкой, после её окончания они возвращаются на поверхность уже мелкой пыли. Это хорошо заметно в распределениях воды и углекислого газа на мелкой пыли на рисунке 3.8. Несмотря на то, что к моменту возникновения вспышек (100–200 тыс. лет) пыль в диске уже существенно выросла и поверхностная плотность крупной пыли на два порядка превышает поверхностную плотность мелкой, мелкая пыль имеет бо́льшую суммарную площадь поверхности. Именно поэтому темп адсорбции молекул на мелкую пыль выше, и адсорбция происходит преимущественно на неё.

Действительно, отношение суммарных площадей поверхности мелкой и крупной пыли из уравнений (3.6) и (3.7) равно ($\Sigma_{d,sm}/\Sigma_{d,gr}$) $\sqrt{a_{max}/a_{min}}$, что ≈ 10 для условий в диапазоне от внутренней линии льдов воды до внешней границы диска. Таким образом, летучие адсорбируют в основном на мелкую пыль, и уже после этого в процессе коагуляции попадают в ледяные мантии на крупной пыли. Отметим, что в сочетании с низкой $\Sigma_{d,sm}$ в окрестности линий льдов мантии на мелких пылинках становятся относительно массивными $\Sigma_s^{sm}/\Sigma_{d,sm} \sim 1$. Подобный эффект проявляется не только от вспышек, но и при прохождении по диску спиральных волн (см. раздел 3.5.4). Возможные следствия этого обсуждаются в разделе 3.6.

На соотношение темпов адсорбции на мелкую и крупную пыль может повлиять также эффект кривизны пылинок [185]. Давление насыщенного пара для пылинок нанометрового размера, имеющих большую кривизну поверхности, выше, чем для крупных, кривизной которых можно пренебречь. Этот эффект важен в тех областях, где темпы адсорбции и десорбции сопоставимы. В работе [186] показано, что в окрестности линии льдов воды пылинки размером 0.1 мм теряют мантии в 100 раз медленнее, чем микронные пылинки. Также этот эффект может приводить к спеканию пылевых агрегатов, при котором лёд вымерзает преимущественно на точки контакта мономеров [142,143]. В данной модели мелкая пыль имеет размер 5–1000 нм, поэтому темп десорбции также может зависеть от кривизны пылинок. Этот эффект не учитывается в модели, хотя потенциально способен привести к уменьшению мантий на мелкой пыли.

3.5.3. Вариации содержания летучих в разных фазах

Показанные на рисунках 3.8 и 3.9 содержания летучих нормированы на поверхностную плотность носителя соответствующей фазы: $\Sigma_{\rm gas}$, $\Sigma_{\rm d,sm}$ или $\Sigma_{d,gr}$. В некоторых областях диска содержание ведёт себя соотвественно равновесным линиям льдов — либо примерно равняется исходному, либо становится очень низким, если вещество переходит преимущественно в противоположную фазу. Однако есть области, где содержание заметно отклоняется от этого описания. Рассмотрим их более подробно.

В модели с $\alpha = 10^{-2}$ содержание газофазных H₂O и CO₂ во внутреннем диске варьируется. Эти вариации коррелируют с изменениями в соотношении между газом и пылью на рисунке 3.6, в то же время в распределениях льдов подобных вариаций не наблюдается. Этот эффект возникает благодаря гравитационной неустойчивости диска. Кольца или массивные сгустки, образованные гравитационной неустойчивостью, содержат много пыли, они мигрируют к звезде, принося с собой льды. Содержание льдов по отношению к пыли в этих сгустках такое же, как и во всём диске, но содержание пыли относительно газа выше. Когда такой сгусток пересекает линию льдов, молекула десорбирует и обогащает собой газ. Для CO и CH₄ подобный эффект незаметен, поскольку сгустки в основном образуются внутри их линий льдов, а в модели с низкой турбулентностью формирование сгустков в диске подавлено (см. раздел 3.4).

Отличительной особенностью модели с $\alpha = 10^{-4}$ является наличие нескольких тепловых линий льдов у воды и углекислого газа. Это вызвано вариациями поверхностной плотности и температуры на кольцах, которые возникают внутри 10 а.е. после 300 тыс. лет. Между кольцами содержание пыли значительно понижено, а содержание летучих стабильно пополняется благодаря адвективному переносу в газовой фазе. В результате содержание летучих относительно пыли повышено, и на поверхности как крупных, так и мелких пылинок образуются толстые ледяные мантии.

Внутри 1 а.е. на рисунке 3.9 у воды появляется ещё одна, инвертированная, линия льдов. К этому результату следует относиться с осторожностью. На границе диска с внутренней поглощающей ячейкой температура падает из-за снижения содержания пыли и соответствующего падения оптической толщины. Это может быть граничным эффектом, который следует исследовать более подробно. Кроме того, при низкой оптической толщине близко к звезде существенным должен становиться вклад от фотодесорбции УФ фотонами от центральной звезды и аккреционной области, который не учитывается в модели.

В окрестности линий льдов содержания летучих повышены и в газовой, и в ледяной фазе. Возникающие пики различаются по амплитуде и ширине и вызваны воздействием разных механизмов. К ним относятся радиальный дрейф покрытых мантиями крупных пылинок, асимметричное распределение вещества и скоростей газа и пыли в диске, сложная форма линий льдов (см. раздел 3.5.4).

Накопление газофазных СО и СН₄ внутри линии льдов вызвано дрейфом крупных пылинок: их ледяные мантии сублимируют при пересечении линий льдов, а после этого молекулярный газ накапливается около линии льдов. Это явление также исследовалось в работах [153] и [154]. В них показано, что при более высокой турбулентности летучие накапливаются слабее, поскольку диффузия, пропорциональная α , эффективнее размывает образующийся пик. В данной работе, однако, эффект турбулентности противоположный: пики в газофазных содержаниях более выражены в модели с $\alpha = 10^{-2}$, чем при $\alpha = 10^{-4}$ (ср. рисунки 3.8 и 3.9). В окрестности этих линий льдов (30–100 а.е.) скорость дрейфа пылинок не зависит от α явно, поскольку в этой области размер пыли ограничен не фрагментацией, а радиальным дрейфом. В данной работе пыль дрейфует быстрее в модели с $\alpha = 10^{-2}$, что приводит к более эффективному накоплению летучих. Это объясняется большим размером пыли и как следствие более высоким числом Стокса, чем в модели с $\alpha = 10^{-4}$.

Накопление льдов сразу за линией льдов было впервые описано в работе [150], а также в [151] для общего случая тугоплавких соединений. В этих моделях газофазное вещество оказывается снаружи от линии льдов за счёт диффузии газа, которая может также вызвать накопление тугоплавких веществ в газовой фазе [187].

В ряде других исследований также было получено преимущественное накопление летучих на мелкой пыли в окрестности их линий льдов [153, 154]. В работе [153] показано, что за линией льдов СО мантии становятся толще. Доля льда в мелкой пыли превышает долю силикатов на 2–3 порядка, в крупной пыли — в 0.5–10 раз. Также показано, что ширина области, в которой накапливается лёд, больше для мелкой пыли [153]. Аналогично, в работе [154] показано, что лёд, накапливающийся за линией льдов СО, находится в основном на мелкой пыли.

В отличие от вышеупомянутых работ, в данной модели диффузия не рассматривается. Накопление летучих в ледяной фазе дрейф пыли объяснить не может. Несмотря на отсутствие в модели турбулентной диффузии, распределение льдов носит отпечаток сходного эффекта, позволяющего перераспределять летучие, находящиеся в газовой фазе и на мелкой пыли.

В представленной модели за это перераспределение отвечает отдельный механизм — вариации радиальных скоростей газа и пыли по азимуту. Даже когда в среднем на заданном радиусе вещество движется внутрь, а азимутально усреднённые скорости для газа и пыли отрицательны, то есть не направлены на звезду, часть вещества всё равно локально движется наружу на протяжении доли кеплеровской орбиты. Пример значений скоростей газа и пыли на выделенном радиусе показан на рисунке 3.11. Осцилляции между отрицательными и положительными скоростями переносят вещество изнутри линий льдов наружу (и в обратном направлении). Можно назвать этот механизм переноса «эффективной диффузией». Амплитуда вариаций скорости во много раз выше, чем средняя по азимуту скорость дрейфа, и эффект проявляется сильнее при низких альфа. Происхождение данных вариаций и их влияние на динамику и эволюцию пыли



Рис. 3.11. Радиальная и азимутальная компоненты скоростей газа (красная кривая) и пыли (чёрная кривая) на разных азимутах ϕ при r = 5.3 а.е. на момент времени 300 тыс. лет в модели с $\alpha = 10^{-2}$. Чёрными кружками отмечены некоторые значения ϕ . Незакрашенными кружками показаны усреднённые по азимуту скорости. Оранжевым цветом показана скорость кеплеровского вращения на данном радиусе с учётом гравитационного вклада от внутреннего диска и поглощающей ячейки.

в диске требуют подробного рассмотрения в рамках отдельного исследования, что выходит за рамки данной диссертационной работы.

3.5.4. Двумерные распределения летучих

На ранних этапах эволюции молодые массивные диски гравитационно неустойчивы, и в них формируются отчётливые спиральные узоры. На временах ~100–200 тыс. лет спирали проявляются в распределениях и газа, и пыли. Это существенно влияет на тепловую структуру диска, которая определяет фазовое состояние летучих и положение их линий льдов. На более поздних временах спирали в газе выражены гораздо слабее, а в пыли отсутствуют совсем, при этом их влияние на скорости газа и пыли сохраняется.

На рисунке 3.12 показаны двумерные распределения по диску двух наименее летучих молекул — H₂O и CO₂ — в трёх фазовых состояниях. Выделена внутренняя область диска, где находятся тепловые линии льдов этих молекул. Помимо распределений летучих показаны положения рав-



Рис. 3.12. Содержание H₂O и CO₂ в газовой и ледяных фазах в момент времени 100 тыс. лет в моделях с $\alpha = 10^{-2}$ (слева) и $\alpha = 10^{-4}$ (справа). Голубой штриховой линией обозначены равновесные положения линий льдов.

новесных линий льдов.

Видно, что даже равновесные линии льдов по форме значительно отличаются от окружности. Они имеют сложную форму, которая несёт на себе отпечаток спирального узора. Это вызвано наличием асимметрий в температуре и плотности диска. Отметим, что с эволюцией диска и уменьшением роли гравитационной неустойчивости форма линий льдов, как и сам диск, приближается к осевой симметрии. Сложная форма линий льдов прежде отмечалась в работе [14] в рамках трёхмерного моделирования диска с химической эволюцией. Авторы [14] описывали отклонение формы линий льдов от осевой симметрии вследствие наличия в диске сгустков, спиралей и ударных волн.

Как и в случае азимутально усреднённых распределений, положения равновесных линий льдов не в точности совпадают с рассчитанным распределением летучих соединений. Они примерно на 1 а.е. смещены наружу

130

по отношению к резким границам между зонами доминирования газовой и ледяной фракций молекул. Это отражает вклад нестационарных процессов адсорбции и десорбции в положение линий льдов, хотя вклад этот не слишком значителен.

Льды могут попадать на поверхность крупной пыли двумя способами: напрямую из газовой фазы путём адсорбции, а также благодаря коагуляции мелких пылинок, которые постепенно превращаются в крупные вместе с ледяными мантиями. Соотношение между льдами на крупной и мелкой пыли на рисунке 3.12 показывает, что в данной модели доминирует второй путь. Видно, что в тех участках диска (на тех расстояниях от звезды), где форма линии льдов искажена наличием спиралей, количество льда на мелкой пыли повышено, а на крупной — понижено. Рассмотрим более подробно, как возникает это распределение.

Спиральная волна плотности проходит по диску и благодаря более высоким плотности и температуре временно сублимирует льды со всей пыли. После прохождения спирали десорбированные льды начинают снова вымерзать, при этом соотношение темпов адсорбции на оба населения пыли пропорционально отношению суммарных площадей поверхности этих населений. Как и в случае вспышек (см. раздел 3.5.2), поскольку суммарная площадь у мелкой пыли больше, чем у крупной, оседание льдов происходит преимущественно на мелкие пылинки.

Влияние спиральных рукавов на летучие соединения более заметно у $\rm CO_2$, чем у $\rm H_2O$. Именно в тех областях диска, где пролегает линия льдов $\rm CO_2$ (десятки а.е.), спирали наиболее выражены и *Q*-параметр Тоомре имеет минимальное значение. Во внутреннем диске гравитационная неустойчивость не развивается из-за значительного кеплеровского сдвига скоростей и высокой температуры. Во внешнем диске поверхностная плотность газа слишком низкая, что тоже ослабляет гравитационную неустойчивость. В модели с $\alpha = 10^{-4}$ диск в целом холоднее, чем при $\alpha = 10^{-2}$, поскольку в ней менее эффективен вязкий нагрев, и линии льдов во внутреннем диске сдвигаются ближе к звезде. Как следствие, влияние спиральных рукавов также становится менее выраженным. Для CH₄ и CO линии льдов находятся далеко от звезды, в области, где влияние спиралей на форму линий льдов не так заметно.

3.6. Толщина и состав ледяных мантий

Как видно из рисунков 3.8, 3.9 и 3.12, в окрестности линий льдов отношение массы ледяных мантий к массе пылинок, на которых эти мантии находятся, может быть больше единицы. В модели с $\alpha = 10^{-2}$ это происходит только для мелкой пыли — масса льда на ней сопоставима с массой самой мелкой пыли. В модели с $\alpha = 10^{-4}$ это проявляется и для мелкой, и для крупной пыли, в особенности в отношении CO₂ и H₂O. В частности, в окрестности линии льдов воды масса льда на мелкой пыли превышает массу мелких пылинок в ~ 300 раз. Массивные мантии почти исключительно состоят из одних и тех же молекул, так как значительное накопление летучих происходит в окрестности их линий льдов.

В модель эволюции пыли, используемую в данной диссертационной работе, заложено предположение о том, что наличие ледяной мантии не влияет на геометрическое сечение пылинки и её массу (см. раздел 3.3). Однако при столь высоких соотношениях между массами льда и пыли это предположение нарушается. Если плотность льда втрое ниже плотности силикатных ядер пылинок, то при добавлении к ней мантии с массой, равной массе силикатного ядра, размер пылинки увеличится в $\sqrt[3]{4} \approx 1.6$ раза, что всё ещё порядка единицы. Для крупной пыли суммарная масса мантии превышает массу пыли не более чем втрое, поэтому предположение нарушается не очень значительно. На небольшом диапазоне расстояний от звезды в модели с $\alpha = 10^{-4}$ для мелкой пыли масса льда может превышать массу силикатов в сотни раз, что означает увеличение размера на порядок.



Рис. 3.13. Кумулятивные радиальные распределения льдов на мелкой (нижний ряд) и крупной (верхний ряд) пыли в разные моменты времени в модели с $\alpha = 10^{-2}$.

Однако доля мелкой пыли невысока, и большинство столкновений происходит между крупными пылинками. Поэтому влияние толстых ледяных мантий на динамику пыли необходимо учитывать в более детальных моделях.

В ходе эволюции диска состав ледяных мантий существенно меняется по сравнению с исходным. Изначально четыре вида льда присутствуют только на поверхности мелкой пыли в соотношении H₂O:CO₂:CO:CH₄ = 100 : 29 : 29 : 5 (см. таблицу 3.1). Рост пыли и вариации скорости дрейфа в разных участках диска, где некоторые молекулы находятся в газовой фазе, а другие — в ледяной, приводят к изменению не только абсолютного, но и относительного количества льдов на пыли.

На рисунках 3.13 и 3.14 показаны радиальные распределения льда на крупной и мелкой пыли относительно поверхностной плотности газа. Несмотря на описанное выше накопление льда на мелкой пыли в окрестно-

133



Рис. 3.14. То же, что и на рисунке 3.13, но для модели с $\alpha = 10^{-4}$. На момент 500 тыс. лет пиковое значение для воды и CO₂ составляет $100 \times \Sigma_{\rm ice} / \Sigma_{\rm gas} \approx 0.5$ (не в масштабе).

сти линий льдов, по этим нормированным на $\Sigma_{\rm gas}$ распределениям видно, что толстые ледяные мантии представляют собой лишь небольшую долю вещества. Типичное отношение льда к газу составляет 0.02–0.08%, более высокие значения ($\approx 1\%$) достигаются лишь рядом с кольцами во внутреннем диске (см. момент 500 тыс. лет на рисунке 3.14). Лишь небольшая часть населения пылинок имеет чрезвычайно толстые мантии.

На раннем этапе (100 тыс. лет) заметно пространственное разделение льдов на мелкой и крупной пыли. Льды на крупной пыли доминируют внутри ≈ 100 а.е., а на мелкой — во внешних частях диска и в оболочке. Это отражает переход льдов, изначально находившихся на мелкой пыли, на поверхность крупной пыли в процессе коагуляции, которая наиболее эффективна в плотном диске и ослаблена на его периферии. Со временем диск распространяется наружу, и рост пыли становится более эффективным во всём диске, где молекулы вымерзают, поэтому на более поздних стади-

ях почти все льды находятся на крупной пыли. На временах 300 тыс. лет и 500 тыс. лет и расстояниях более 100 а.е. на мелкой пыли остаётся лишь небольшая доля льда.

Суммарное содержание льдов в диске со временем падает, поскольку дрейфующие внутрь пылинки приносят летучие во внутренний диск, где они переходят в газовую фазу и впоследствии аккрецируют на звезду. За первые 0.5 млн лет глобальное по диску соотношение между льдом и газом уменьшается примерно вдвое. И на мелкой, и на крупной пыли в тех областях, где молекулы находятся преимущественно в ледяной фазе, количество льда меняется более чем на порядок в зависимости от расстояния до звезды.

В распределении состава ледяных мантий на рисунках 3.13 и 3.14 чётко прослеживаются положения линий льдов. Так, во внутреннем диске мантии состоят только из воды, при удалении от звезды добавляются поочерёдно CO₂, CH₄ и CO. Соотношения между льдами заметно меняются. Если сначала они близки к исходным содержаниям из таблицы 3.1, то на масштабе сотен тысяч лет доля CO₂ и CO растёт и начинает превышать долю воды. Например, на момент 500 тыс. лет на расстояниях 100–200 а.е. половина льда на крупной пыли — это лёд CO, а мантии на мелкой пыли состоят из CO почти полностью. В модели с $\alpha = 10^{-4}$ молекула CO₂ является основной компонентой в составе мантий на 10–30 а.е. Количество льда CO также растёт с возрастом диска, хотя в течение первых $\approx 200-300$ тыс. лет эта молекула находится в основном в газовой фазе. Это согласуется с наблюдениями [188].

Химическая эволюция диска совместно с динамикой пыли и газа также рассматривалась другими авторами. Детальное астрохимическое моделирование квазистационарного диска демонстрирует, что на временах порядка миллионов лет СО может разрушаться как в газовой, так и в ледяной фазе. Это может происходить в результате химического превращения в CO₂, CH₄ или CH₃OH [90, 189] или вследствие значительной ионизации космическими лучами и УФ излучением [190, 191]. Химическое разрушение CO также подробно обсуждается в Главе 1 данной диссертационной работы и опубликовано в [A1].

Модели, которые включают динамику пылевых частиц, показали, что в дисках с высокой вязкостью ($\alpha > 10^{-3}$) дрейф крупной пыли более существенен, чем химическое разрушение СО, СН₄ и СО₂ [192]. При этом отмечалось, что высокий темп ионизации космическими лучами ($\zeta_{CR} = 10^{-17}$) может повысить эффективность химических процессов разрушения [90, 192]. Химическое моделирование с учётом переноса пылинок показывает понижение содержания СО в газе на два порядка [193]. В модели, представленной в рамках диссертационной работы, эволюция диска рассматривается на протяжении нескольких сотен тысяч лет, однако химическое разрушение может начинать работать и на таких ранних стадиях эволюции.

3.7. Обсуждение результатов

Представленная модель динамики летучих соединений и проведённые расчёты позволяют сделать несколько выводов о летучих соединениях в протопланетных дисках. Перечислим основные выводы, касающиеся влияния ледяных мантий на свойства пыли, а также особенностей распределения летучих соединений по диску.

Рассмотрение пылинок, у которых скорость фрагментации зависит от наличия или отсутствия ледяных мантий, показало, что мантии заметно влияют на свойства пыли только при высоком значении параметра турбулентности $\alpha = 10^{-2}$. Размер и поверхностная плотность пыли резко меняются на тепловой линии льдов воды, так как именно на ней происходит качественный переход от менее чем однослойной мантии к многослойной. При более низкой турбулентности ($\alpha = 10^{-4}$) фрагментация не является главным ограничителем роста пыли в основном объёме диска, поэтому влияние наличия мантий на параметры пыли не выражено.

Кроме того, несмотря на то, что в модели не предполагается рассмотрение отдельных пылевых частиц, анализ взаимодействия между льдами на мелкой и крупной пыли позволил сделать выводы о внутреннем строении пылинок. Показано, что летучие соединения оседают из газовой фазы преимущественно на мелкую пыль. Они попадают на поверхность крупной пыли в основном благодаря коагуляции мелких пылинок, а не напрямую из газовой фазы. Из-за вспышек светимости, а также сложной формы линий льдов, вызванной наличием спиралей, в окрестности линий льдов происходит эпизодическая сублимация ледяных мантий и их реконденсация на мелкую пыль. Таким образом, крупные пылинки представляют собой скорее агрегаты из слипшихся мелких мономеров, каждый из которых покрыт отдельной мантией, чем единое каменное ядро, покрытое общей ледяной мантией. Это может быть важно при пересечении пылинками линий льдов, в особенности линии льдов воды. Для таких агрегатов сублимация мантии должна приводить также к распаду пылинки на мономеры, то есть значительному уменьшению размера пыли.

Наиболее примечательной особенностью распределения самих летучих соединений оказалось их накопление вдоль линий льдов и в газовой, и в ледяной фазе, проявляющееся у всех рассмотренных молекул. Ширина области накопления и степень повышения содержания летучих, как и сам механизм накопления могут варьироваться. Ярче всего выражено накопление льдов H₂O и CO₂ на поверхности мелкой пыли, где масса мантии может превышать массу каменного ядра пылинки в несколько раз (при $\alpha = 10^{-2}$) или в сотни раз (при $\alpha = 10^{-4}$). Такие массивные мантии могут вносить дополнительный вклад в динамику пыли, кроме того, наличие пылинок, в основном состоящих не из силикатов, а изо льда, может быть важным в контексте образования планет.

3.8. Положения, выносимые на защиту

По результатам третьей главы на защиту выносятся следующие положения:

- Разработана модель адсорбции и десорбции летучих соединений для многокомпонентной модели пыли. Модель добавлена в двумерный гидродинамический код FEOSAD, что обеспечило возможность рассматривать совместную динамику газа, пыли и льдов в протопланетных дисках. С помощью данной модели показано, что при высокой турбулентности ледяные мантии вызывают заметное изменение свойств пыли в окрестности линии льдов воды.
- Показано, что льды попадают на крупную пыль, главным образом, в результате коагуляции обледеневших мелких пылинок. Вдоль линий льдов накапливаются газофазные и ледяные летучие соединения, при этом повышение их содержания относительно среднего уровня может достигать двух порядков величины.

Заключение

В данной диссертационной работе моделирование химического состава газа и льда на поверхности применяется в качестве инструмента исследования различных аспектов строения и эволюции протопланетных дисков.

Поиск индикаторов массы протопланетных дисков, с одной стороны, позволил обосновать применение CO как наиболее перспективного индикатора массы, количество которого в диске действительно лучше, чем у других молекул, коррелирует с массой газа. С другой стороны, детальный анализ химических процессов с участием CO в диске показал, что его среднее содержание уменьшается под действием реакций на поверхности пыли. Это позволяет заключить, что низкие значения определённых по CO масс дисков по сравнению с массами, определёнными по пыли, по крайней мере отчасти могут быть вызваны этим эффектом.

С помощью астрохимического моделирования был рассчитан теоретический состав протопланетных дисков, испытывающих вспышки светимости. Моделирование позволило предсказать содержание сложных органических молекул во вспышечных объектах, эти расчёты получили наблюдательное подтверждение после детектирования новых соединений в диске вокруг V 883 Ориона. Кроме того, идентифицированы молекулы, наблюдение которых в дисках может быть индикатором наличия прошлой вспышечной активности и позволит расширить выборку известных фуоров.

Рассмотрение динамической эволюции летучих соединений в самогравитирующем протопланетном диске с растущей пылью позволило сделать вывод о влиянии ледяных мантий на параметры пылевого ансамбля. Полученные распределения летучих и вывод об их накоплении в окрестности линий льдов могут быть использованы в качестве теоретических оснований для дальнейшего развития теории формирования планет.

Разработанные в диссертации методы могут применяться для дальнейшего исследования состава протопланетных дисков. В частности, химические последствия вспышек светимости можно рассмотреть для экзоров, вспышки которых имеют меньшую амплитуду, но повторяются на масштабах нескольких лет, что упрощает соотнесение с наблюдательными данными. Развитие модели динамической эволюции летучих может быть продолжено по ряду направлений: включение состава и температуры мантий в качестве факторов, влияющих на фрагментацию пыли; рассмотрение дополнительных молекул; добавление химической эволюции ледяных мантий; исследование влияния различных параметров модели диска на динамику летучих.

Благодарности

Диссертантка выражает благодарность В. В. Акимкину за научное руководство, а также благодарит своих коллег и соавторов, в особенности Д. З. Вибе, Д. А. Семёнова и Э. И. Воробьёва, за помощь в работе и плодотворное сотрудничество.

Литература

- Dutrey et al. (2014) Physical and Chemical Structure of Planet-Forming Disks Probed by Millimeter Observations and Modeling // Protostars and Planets VI - 2014. - P. 317.
- ALMA Partnership et al. (2015) The 2014 ALMA Long Baseline Campaign: First Results from High Angular Resolution Observations toward the HL Tau Region // Astrophys. J. Let - 2015. - V. 808. -L3.
- Andrews et al. (2018) The Disk Substructures at High Angular Resolution Project (DSHARP). I. Motivation, Sample, Calibration, and Overview // Astrophys. J. Let - 2018. - V. 869. - L41.
- Oberg, Murray-Clay, & Bergin (2011) The Effects of Snowlines on C/O in Planetary Atmospheres // Astrophys. J. Let - 2011. - V. 743. - L16.
- Cridland, Eistrup, & van Dishoeck (2019) Connecting planet formation and astrochemistry. Refractory carbon depletion leading to super-stellar C/O in giant planetary atmospheres // Astron. and Astrophys - 2019. -V. 627. - A127.
- Bitsch & Johansen (2016) Influence of the water content in protoplanetary discs on planet migration and formation // Astron. and Astrophys 2016.
 V. 590. A101.
- Garrod, Widicus Weaver, & Herbst (2008) Complex Chemistry in Starforming Regions: An Expanded Gas-Grain Warm-up Chemical Model // Astrophys. J – 2008. – V. 682. – Pp. 283-302.

- McElroy et al. (2013) The UMIST database for astrochemistry 2012 // Astron. and Astrophys - 2013. - V. 550. - A36.
- Wakelam et al. (2015) The 2014 KIDA Network for Interstellar Chemistry // Astrophys. J. Suppl - 2015. - V. 217. - A20.
- Henning & Semenov (2013) Chemistry in Protoplanetary Disks // Chemical Reviews - 2013. - V. 113. - Pp. 9016-9042.
- Woitke, Kamp, & Thi (2009) Radiation thermo-chemical models of protoplanetary disks. I. Hydrostatic disk structure and inner rim // Astron. and Astrophys - 2009. - V. 501. - Pp. 383-406.
- Bruderer, van Dishoeck, Doty, & Herczeg (2012) The warm gas atmosphere of the HD 100546 disk seen by Herschel. Evidence of a gas-rich, carbon-poor atmosphere? // Astron. and Astrophys — 2012. — V. 541. — A91.
- Akimkin et al. (2013) Protoplanetary Disk Structure with Grain Evolution: The ANDES Model // Astrophys. J - 2013. - V. 766. - A8.
- 14. Ilee et al. (2017) The chemistry of protoplanetary fragments formed via gravitational instabilities // Monthly Notices Roy. Astron. Soc 2017. V. 472. Pp. 189-204.
- Vorobyov, Baraffe, Harries, & Chabrier (2013) The effect of episodic accretion on the phase transition of CO and CO₂ in low-mass star formation // Astron. and Astrophys − 2013. − V. 557. − A35.
- Audard et al. (2014) Episodic Accretion in Young Stars // Protostars and Planets VI - 2014. - P. 387.
- Lee (2007) Chemical Evolution in VeLLOs // Journal of Korean Astronomical Society - 2007. - V. 40. - Pp. 83-89.
- Dunham & Vorobyov (2012) Resolving the Luminosity Problem in Lowmass Star Formation // Astrophys. J − 2012. – V. 747. – A52.

- Vorobyov et al. (2018) Early evolution of viscous and self-gravitating circumstellar disks with a dust component // Astron. and Astrophys 2018. V. 614. A98.
- Williams & Cieza (2011) Protoplanetary Disks and Their Evolution // An. Rev. Astron. Astrophys - 2011. - V. 49. - Pp. 67-117.
- 21. Armitage (2015) Physical processes in protoplanetary disks // arXiv eprints - 2015. - V. . - arXiv:1509.06382.
- 22. Keppler et al. (2018) Discovery of a planetary-mass companion within the gap of the transition disk around PDS 70 // Astron. and Astrophys 2018.
 V. 617. A44.
- Haffert et al. (2019) Two accreting protoplanets around the young star PDS 70 // Nature Astronomy - 2019. - V. 3. - Pp. 749-754.
- Mesa et al. (2019) VLT/SPHERE exploration of the young multiplanetary system PDS70 // Astron. and Astrophys — 2019. — V. 632. — A25.
- 25. Mordasini et al. (2012) Extrasolar planet population synthesis . IV. Correlations with disk metallicity, mass, and lifetime // Astron. and Astrophys - 2012. - V. 541. - A97.
- 26. Bitsch, Lambrechts, & Johansen (2015) The growth of planets by pebble accretion in evolving protoplanetary discs // Astron. and Astrophys 2015.
 V. 582. A112.
- 27. Andrews & Williams (2005) Circumstellar Dust Disks in Taurus-Auriga: The Submillimeter Perspective // Astrophys. J - 2005. - V. 631. - Pp. 1134-1160.
- Bohlin, Savage, & Drake (1978) A survey of interstellar H I from Lalpha absorption measurements. II. // Astrophys. J-1978. - V. 224. - Pp. 132-142.
- Ansdell et al. (2016) ALMA Survey of Lupus Protoplanetary Disks. I. Dust and Gas Masses // Astrophys. J - 2016. - V. 828. - A46.
- Draine (2006) On the Submillimeter Opacity of Protoplanetary Disks // Astrophys. J - 2006. - V. 636. - Pp. 1114-1120.
- 31. Henning & Meeus (2011) Dust Processing and Mineralogy in Protoplanetary Accretion Disks // Physical Processes in Circumstellar Disks around Young Stars - 2011. - Pp. 114-148.
- 32. Dunham, Vorobyov, & Arce (2014) On the reliability of protostellar disc mass measurements and the existence of fragmenting discs // Monthly Notices Roy. Astron. Soc - 2014. - V. 444. - Pp. 887-901.
- 33. Tsukamoto, Okuzumi, & Kataoka (2017) Apparent Disk-mass Reduction and Planetisimal Formation in Gravitationally Unstable Disks in Class 0/I Young Stellar Objects // Astrophys. J - 2017. - V. 838. - A151.
- 34. Carmona et al. (2011) A survey for near-infrared H₂ emission in Herbig Ae/Be stars: emission from the outer disks of HD 97048 and HD 100546 // Astron. and Astrophys 2011. V. 533. A39.
- 35. Bergin et al. (2013) An old disk still capable of forming a planetary system // Nature - 2013. - V. 493. - Pp. 644-646.
- McClure et al. (2016) Mass Measurements in Protoplanetary Disks from Hydrogen Deuteride // Astrophys. J - 2016. - V. 831. - A167.
- 37. Trapman et al. (2017) Far-infrared HD emission as a measure of protoplanetary disk mass // Astron. and Astrophys 2017. V. 605. A69.
- Goldsmith, Bergin, & Lis (1997) Carbon Monoxide and Dust Column Densities: The Dust-to-Gas Ratio and Structure of Three Giant Molecular Cloud Cores // Astrophys. J – 1997. – V. 491. – Pp. 615-637.

- Bolatto, Wolfire, & Leroy (2013) The CO-to-H₂ Conversion Factor // An. Rev. Astron. Astrophys − 2013. − V. 51. − Pp. 207-268.
- 40. Williams & Best (2014) A Parametric Modeling Approach to Measuring the Gas Masses of Circumstellar Disks // Astrophys. J − 2014. V. 788. A59.
- 41. Miotello, van Dishoeck, Kama, & Bruderer (2016) Determining protoplanetary disk gas masses from CO isotopologues line observations // Astron. and Astrophys − 2016. − V. 594. − A85.
- 42. Williams & McPartland (2016) Measuring Protoplanetary Disk Gas Surface Density Profiles with ALMA // Astrophys. J – 2016. – V. 830. – A32.
- 43. France, Herczeg, McJunkin, & Penton (2014) CO/H₂ Abundance Ratio \approx 10⁻⁴ in a Protoplanetary Disk // Astrophys. J 2014. V. 794. A160.
- 44. Aikawa, van Zadelhoff, van Dishoeck, & Herbst (2002) Warm molecular layers in protoplanetary disks // Astron. and Astrophys - 2002. - V. 386. - Pp. 622-632.
- 45. Lacy, Knacke, Geballe, & Tokunaga (1994) Detection of Absorption by H 2 in Molecular Clouds: A Direct Measurement of the H 2:CO Ratio // Astrophys. J. Let - 1994. - V. 428. - L69.
- 46. *Qi et al. (2011)* Resolving the CO Snow Line in the Disk around HD 163296 // Astrophys. J = 2011. - V. 740. - A84.
- 47. Zhang et al. (2017) Mass inventory of the giant-planet formation zone in a solar nebula analogue // Nature Astronomy - 2017. - V. 1. - A0130.
- Aikawa, Miyama, Nakano, & Umebayashi (1996) Evolution of Molecular Abundance in Gaseous Disks around Young Stars: Depletion of CO Molecules // Astrophys. J – 1996. – V. 467. – P. 684.

- 49. Ansdell et al. (2017) An ALMA Survey of Protoplanetary Disks in the σ Orionis Cluster // Astron. J - 2017. - V. 153. - A240.
- 50. Miotello et al. (2017) Lupus disks with faint CO isotopologues: low gas/dust or high carbon depletion? // Astron. and Astrophys 2017. V. 599. A113.
- Yu et al. (2016) Probing Planet Forming Zones with Rare CO Isotopologues
 // Astrophys. J 2016. V. 822. A53.
- 52. Vasyunina, Vasyunin, Herbst, & Linz (2012) Chemical Modeling of Infrared Dark Clouds: The Role of Surface Chemistry // Astrophys. J – 2012. – V. 751. – A105.
- Yu et al. (2017) Disk Masses around Solar-mass Stars are Underestimated by CO Observations // Astrophys. J - 2017. - V. 841. - A39.
- 54. Semenov & Wiebe (2011) Chemical Evolution of Turbulent Protoplanetary Disks and the Solar Nebula // Astrophys. J. Suppl 2011. V. 196. A25.
- 55. Isella et al. (2016) Ringed Structures of the HD 163296 Protoplanetary Disk Revealed by ALMA // Phys. Rev. Lett. - 2016. - V. 117. - A251101.
- 56. Chiang & Goldreich (1997) Spectral Energy Distributions of T Tauri Stars with Passive Circumstellar Disks // Astrophys. J − 1997. − V. 490. − Pp. 368-376.
- Dullemond, Dominik, & Natta (2001) Passive Irradiated Circumstellar Disks with an Inner Hole // Astrophys. J – 2001. – V. 560. – Pp. 957-969.
- Dullemond & Dominik (2004) The effect of dust settling on the appearance of protoplanetary disks // Astron. and Astrophys — 2004. — V. 421. — Pp. 1075-1086.

- Hartmann, Herczeg, & Calvet (2016) Accretion onto Pre-Main-Sequence Stars // An. Rev. Astron. Astrophys - 2016. - V. 54. - Pp. 135-180.
- Johns-Krull, Valenti, & Linsky (2000) An IUE Atlas of Pre-Main-Sequence Stars. II. Far-Ultraviolet Accretion Diagnostics in T Tauri Stars // Astrophys. J - 2000. - V. 539. - Pp. 815-833.
- Matsuyama, Johnstone, & Hartmann (2003) Viscous Diffusion and Photoevaporation of Stellar Disks // Astrophys. J - 2003. - V. 582. -Pp. 893-904.
- 62. Mathis, Mezger, & Panagia (1983) Interstellar radiation field and dust temperatures in the diffuse interstellar matter and in giant molecular clouds. // Astron. and Astrophys – 1983. – V. 500. – Pp. 259-276.
- 63. Baraffe, Homeier, Allard, & Chabrier (2015) New evolutionary models for pre-main sequence and main sequence low-mass stars down to the hydrogenburning limit // Astron. and Astrophys - 2015. - V. 577. - A42.
- Mathis, Rumpl, & Nordsieck (1977) The size distribution of interstellar grains. // Astrophys. J – 1977. – V. 217. – Pp. 425-433.
- Bai & Goodman (2009) Heat and Dust in Active Layers of Protostellar Disks // Astrophys. J − 2009. − V. 701. − Pp. 737-755.
- 66. Sano, Miyama, Umebayashi, & Nakano (2000) Magnetorotational Instability in Protoplanetary Disks. II. Ionization State and Unstable Regions // Astrophys. J - 2000. - V. 543. - Pp. 486-501.
- 67. Semenov, Wiebe, & Henning (2004) Reduction of chemical networks. II. Analysis of the fractional ionisation in protoplanetary discs // Astron. and Astrophys 2004. V. 417. Pp. 93-106.
- 68. Lee et al. (1998) Bistability in large chemical networks: a global view // Astron. and Astrophys 1998. V. 334. Pp. 1047-1055.

- Vasyunin, Caselli, Dulieu, & Jiménez-Serra (2017) Formation of Complex Molecules in Prestellar Cores: A Multilayer Approach // Astrophys. J – 2017. – V. 842. – A33.
- Testi et al. (2014) Dust Evolution in Protoplanetary Disks // Protostars and Planets VI - 2014. - P. 339.
- 71. Birnstiel, Klahr, & Ercolano (2012) A simple model for the evolution of the dust population in protoplanetary disks // Astron. and Astrophys 2012. V. 539. A148.
- Dutrey, Guilloteau, & Guelin (1997) Chemistry of protosolar-like nebulae: The molecular content of the DM Tau and GG Tau disks. // Astron. and Astrophys - 1997. - V. 317. - Pp. L55-L58.
- 73. Thi et al. (2011) Detection of CH⁺ emission from the disc around HD 100546 // Astron. and Astrophys 2011. V. 530. L2.
- 74. Dutrey et al. (2011) Chemistry in disks. V. Sulfur-bearing molecules in the protoplanetary disks surrounding LkCa15, MWC480, DM Tauri, and GO Tauri // Astron. and Astrophys - 2011. - V. 535. - A104.
- 75. Chapillon et al. (2012) Chemistry in disks. VI. CN and HCN in protoplanetary disks // Astron. and Astrophys 2012. V. 537. A60.
- 76. Qi, Öberg, & Wilner (2013) H₂CO and N₂H⁺ in Protoplanetary Disks: Evidence for a CO-ice Regulated Chemistry // Astrophys. J - 2013. -V. 765. - A34.
- 77. Oberg et al. (2015) The comet-like composition of a protoplanetary disk as revealed by complex cyanides // Nature - 2015. - V. 520. - Pp. 198-201.
- Walsh et al. (2016) First Detection of Gas-phase Methanol in a Protoplanetary Disk // Astrophys. J. Let - 2016. - V. 823. - L10.

- 79. Guilloteau et al. (2016) Chemistry in disks. X. The molecular content of protoplanetary disks in Taurus // Astron. and Astrophys 2016. V. 592. A124.
- 80. Salinas et al. (2016) First detection of gas-phase ammonia in a planetforming disk. NH₃, N₂H⁺, and H₂O in the disk around TW Hydrae // Astron. and Astrophys - 2016. - V. 591. - A122.
- Lee et al. (2019) The ice composition in the disk around V883 Ori revealed by its stellar outburst // Nature Astronomy - 2019. - V. 3. - Pp. 314-319.
- 82. Chapillon, Parise, Guilloteau, & Du (2011) A deep search for H₂D⁺ in protoplanetary disks. Perspectives for ALMA // Astron. and Astrophys − 2011. − V. 533. − A143.
- 83. Bergin et al. (2010) Sensitive limits on the abundance of cold water vapor in the DM Tauri protoplanetary disk // Astron. and Astrophys - 2010. -V. 521. - L33.
- Hogerheijde et al. (2011) Detection of the Water Reservoir in a Forming Planetary System // Science - 2011. - V. 334. - P. 338.
- Henning & Semenov (2008) The birth and death of organic molecules in protoplanetary disks // Organic Matter in Space - 2008. - V. 251. -Pp. 89-98.
- 86. Loomis et al. (2015) The Distribution and Chemistry of H₂CO in the DM Tau Protoplanetary Disk // Astrophys. J. Let 2015. V. 809. L25.
- 87. Oberg et al. (2017) H₂CO Distribution and Formation in the TW HYA Disk // Astrophys. J = 2017. V. 839. A43.
- 88. Harsono, Bruderer, & van Dishoeck (2015) Volatile snowlines in embedded disks around low-mass protostars // Astron. and Astrophys 2015. V. 582. A41.

- Favre et al. (2013) A Significantly Low CO Abundance toward the TW Hya Protoplanetary Disk: A Path to Active Carbon Chemistry? // Astrophys. J. Let - 2013. - V. 776. - L38.
- 90. Bosman, Walsh, & van Dishoeck (2018) CO destruction in protoplanetary disk midplanes: Inside versus outside the CO snow surface // Astron. and Astrophys - 2018. - V. 618. - A182.
- 91. Reboussin et al. (2015) Chemistry in protoplanetary disks: the gas-phase CO/H₂ ratio and the carbon reservoir // Astron. and Astrophys 2015. V. 579. A82.
- 92. Visser, van Dishoeck, & Black (2009) The photodissociation and chemistry of CO isotopologues: applications to interstellar clouds and circumstellar disks // Astron. and Astrophys - 2009. - V. 503. - Pp. 323-343.
- 93. Mumma & Charnley (2011) The Chemical Composition of Comets—Emerging Taxonomies and Natal Heritage // An. Rev. Astron. Astrophys - 2011. - V. 49. - Pp. 471-524.
- 94. Hässig et al. (2015) Time variability and heterogeneity in the coma of 67P/Churyumov-Gerasimenko // Science - 2015. - V. 347. - aaa0276.
- 95. Herbst & van Dishoeck (2009) Complex Organic Interstellar Molecules // An. Rev. Astron. Astrophys - 2009. - V. 47. - Pp. 427-480.
- 96. Miotello, Bruderer, & van Dishoeck (2014) Protoplanetary disk masses from CO isotopologue line emission // Astron. and Astrophys - 2014. -V. 572. - A96.
- 97. Hartmann & Kenyon (1996) The FU Orionis Phenomenon // An. Rev. Astron. Astrophys - 1996. - V. 34. - Pp. 207-240.
- Quanz et al. (2007) Evolution of Dust and Ice Features around FU Orionis Objects // Astrophys. J - 2007. - V. 668. - Pp. 359-383.

- 99. Hales et al. (2020) ALMA Observations of Young Eruptive Stars: Continuum Disk Sizes and Molecular Outflows // Astrophys. J – 2020. – V. 900. – A7.
- 100. Visser & Bergin (2012) Fundamental Aspects of Episodic Accretion Chemistry Explored with Single-point Models // Astrophys. J. Let - 2012.
 - V. 754. - L18.
- 101. Kim et al. (2012) CO₂ Ice Toward Low-luminosity Embedded Protostars: Evidence for Episodic Mass Accretion via Chemical History // Astrophys. J - 2012. - V. 758. - A38.
- 102. Rab et al. (2017) The chemistry of episodic accretion in embedded objects.
 2D radiation thermo-chemical models of the post-burst phase // Astron. and Astrophys - 2017. - V. 604. - A15.
- 103. Jørgensen et al. (2013) A Recent Accretion Burst in the Low-mass Protostar IRAS 15398-3359: ALMA Imaging of Its Related Chemistry // Astrophys. J. Let - 2013. - V. 779. - L22.
- 104. Abrahám et al. (2009) Episodic formation of cometary material in the outburst of a young Sun-like star // Nature — 2009. — V. 459. — Pp. 224-226.
- 105. Juhász et al. (2012) The 2008 Outburst of EX Lup—Silicate Crystals in Motion // Astrophys. J - 2012. - V. 744. - A118.
- 106. Pontoppidan & Blevins (2014) The chemistry of planet-forming regions is not interstellar // Faraday Discussions — 2014. — V. 168. — Pp. 49-60.
- 107. Pontoppidan et al. (2014) Volatiles in Protoplanetary Disks // Protostars and Planets VI - 2014. - P. 363.
- 108. Cieza et al. (2016) Imaging the water snow-line during a protostellar outburst // Nature - 2016. - V. 535. - Pp. 258-261.

- 109. Schoonenberg, Okuzumi, & Ormel (2017) What pebbles are made of: Interpretation of the V883 Ori disk // Astron. and Astrophys - 2017. - V. 605. - L2.
- 110. Hsieh et al. (2018) Probing Episodic Accretion in Very Low Luminosity Objects // Astrophys. J - 2018. - V. 854. - A15.
- 111. Hubbard (2017) FU Orionis outbursts, preferential recondensation of water ice, and the formation of giant planets // Monthly Notices Roy. Astron. Soc - 2017. - V. 465. - Pp. 1910-1914.
- 112. Birnstiel, Dullemond, & Brauer (2010) Gas- and dust evolution in protoplanetary disks // Astron. and Astrophys 2010. V. 513. A79.
- 113. Vorobyov, Pavlyuchenkov, & Trinkl (2014) Influence of luminosity bursts on properties of protostellar disks // Astronomy Reports - 2014. - V. 58. - Pp. 522-536.
- 114. Kastner et al. (2004) An X-ray outburst from the rapidly accreting young star that illuminates McNeil's nebula // Nature 2004. V. 430. Pp. 429-431.
- 115. Skinner, Sokal, Güdel, & Briggs (2009) X-ray Emission from the FU Orionis Star V1735 Cygni // Astrophys. J-2009. - V. 696. - Pp. 766-774.
- 116. Liebhart, Güdel, Skinner, & Green (2014) X-ray emission from an FU Orionis star in early outburst: HBC 722 // Astron. and Astrophys — 2014. — V. 570. — L11.
- 117. Hamaguchi et al. (2010) Suzaku Observation of Strong Fluorescent Iron Line Emission from the Young Stellar Object V1647 ORI During its New X-ray Outburst // Astrophys. J. Let - 2010. - V. 714. - Pp. L16-L20.
- 118. Teets et al. (2011) X-Ray Production by V1647 Ori during Optical Outbursts // Astrophys. J - 2011. - V. 741. - A83.

- 119. Hamaguchi et al. (2012) X-Raying the Beating Heart of a Newborn Star: Rotational Modulation of High-energy Radiation from V1647 Ori // Astrophys. J = 2012. – V. 754. – A32.
- 120. Skinner, Güdel, Briggs, & Lamzin (2010) Chandra Reveals Variable Multi-component X-ray Emission From FU Orionis // Astrophys. J-2010. - V. 722. - Pp. 1654-1665.
- 121. Pooley & Green (2010) X-ray and Ultraviolet detection of the new FU Orionis object HBC 722 // The Astronomer's Telegram - 2010. - V. 3040. - A1.
- 122. Pooley, Green, Skinner, & Guedel (2015) X-ray detection of 2MASS J06593158-0405277 // The Astronomer's Telegram 2015. V. 7025. A1.
- 123. Audard et al. (2016) Swift and SMARTS observations of the 2015 outburst of V1118 Ori // The Astronomer's Telegram - 2016. - V. 8548. - A1.
- 124. Visser, van Dishoeck, Doty, & Dullemond (2009) The chemical history of molecules in circumstellar disks. I. Ices // Astron. and Astrophys 2009.
 V. 495. Pp. 881-897.
- 125. Drozdovskaya et al. (2016) Cometary ices in forming protoplanetary disc midplanes // Monthly Notices Roy. Astron. Soc — 2016. — V. 462. — Pp. 977-993.
- 126. Eistrup, Walsh, & van Dishoeck (2016) Setting the volatile composition of (exo)planet-building material. Does chemical evolution in disk midplanes matter? // Astron. and Astrophys - 2016. - V. 595. - A83.
- 127. Vasyunin et al. (2011) Impact of Grain Evolution on the Chemical Structure of Protoplanetary Disks // Astrophys. J - 2011. - V. 727. -A76.

- 128. Liu et al. (2018) A 1.3 mm SMA survey of 29 variable young stellar objects // Astron. and Astrophys - 2018. - V. 612. - A54.
- 129. Cieza et al. (2018) The ALMA early science view of FUor/EXor objects V. Continuum disc masses and sizes // Monthly Notices Roy. Astron. Soc
 2018. V. 474. Pp. 4347-4357.
- 130. Belloche, Garrod, Müller, & Menten (2014) Detection of a branched alkyl molecule in the interstellar medium: iso-propyl cyanide // Science 2014.
 V. 345. Pp. 1584-1587.
- 131. Thi, van Zadelhoff, & van Dishoeck (2004) Organic molecules in protoplanetary disks around T Tauri and Herbig Ae stars // Astron. and Astrophys - 2004. - V. 425. - Pp. 955-972.
- 132. Pacheco-Vázquez et al. (2016) High spatial resolution imaging of SO and H₂CO in AB Auriga: The first SO image in a transitional disk // Astron. and Astrophys - 2016. - V. 589. - A60.
- 133. Carney et al. (2017) Increased H₂CO production in the outer disk around HD 163296 // Astron. and Astrophys - 2017. - V. 605. - A21.
- 134. Mandell et al. (2012) First Detection of Near-infrared Line Emission from Organics in Young Circumstellar Disks // Astrophys. J - 2012. - V. 747. - A92.
- 135. Carr & Najita (2008) Organic Molecules and Water in the Planet Formation Region of Young Circumstellar Disks // Science - 2008. -V. 319. - P. 1504.
- 136. Carr & Najita (2011) Organic Molecules and Water in the Inner Disks of T Tauri Stars // Astrophys. J - 2011. - V. 733. - A102.

- 137. Najita et al. (2018) Spectrally Resolved Mid-infrared Molecular Emission from Protoplanetary Disks and the Chemical Fingerprint of Planetesimal Formation // Astrophys. J - 2018. - V. 862. - A122.
- 138. Hayashi (1981) Structure of the Solar Nebula, Growth and Decay of Magnetic Fields and Effects of Magnetic and Turbulent Viscosities on the Nebula // Progress of Theoretical Physics Supplement - 1981. - V. 70. -Pp. 35-53.
- 139. Stevenson (1985) Cosmochemistry and structure of the giant planets and their satellites // Icarus - 1985. - V. 62. - Pp. 4-15.
- 140. Lodders (2003) Solar System Abundances and Condensation Temperatures of the Elements // Astrophys. J - 2003. - V. 591. -Pp. 1220-1247.
- 141. van 't Hoff et al. (2018) Methanol and its Relation to the Water Snowline in the Disk around the Young Outbursting Star V883 Ori // Astrophys. J. Let - 2018. - V. 864. - L23.
- 142. Sirono (2011) The Sintering Region of Icy Dust Aggregates in a Protoplanetary Nebula // Astrophys. J = 2011. V.735. A131.
- 143. Okuzumi et al. (2016) Sintering-induced Dust Ring Formation in Protoplanetary Disks: Application to the HL Tau Disk // Astrophys. J - 2016. - V. 821. - A82.
- 144. Makalkin & Dorofeeva (2009) Temperature distribution in the solar nebula at successive stages of its evolution // Solar System Research - 2009. -V. 43. - Pp. 508-532.
- 145. Hughes & Armitage (2010) Particle Transport in Evolving Protoplanetary Disks: Implications for Results from Stardust // Astrophys. J - 2010. – V. 719. – Pp. 1633-1653.

- 146. Piso, Oberg, Birnstiel, & Murray-Clay (2015) C/O and Snowline Locations in Protoplanetary Disks: The Effect of Radial Drift and Viscous Gas Accretion // Astrophys. J – 2015. – V. 815. – A109.
- 147. Pinilla, Pohl, Stammler, & Birnstiel (2017) Dust Density Distribution and Imaging Analysis of Different Ice Lines in Protoplanetary Disks // Astrophys. J − 2017. – V. 845. – A68.
- 148. Ilee et al. (2011) Chemistry in a gravitationally unstable protoplanetary disc // Monthly Notices Roy. Astron. Soc — 2011. — V. 417. — Pp. 2950-2961.
- 149. Evans et al. (2015) Gravitational instabilities in a protosolar-like disc I.
 Dynamics and chemistry // Monthly Notices Roy. Astron. Soc 2015. V. 453. Pp. 1147-1163.
- 150. Stevenson & Lunine (1988) Rapid formation of Jupiter by diffusive redistribution of water vapor in the solar nebula // Icarus 1988. V. 75. Pp. 146-155.
- 151. Cuzzi & Zahnle (2004) Material Enhancement in Protoplanetary Nebulae by Particle Drift through Evaporation Fronts // Astrophys. J - 2004. – V. 614. – Pp. 490-496.
- 152. Drążkowska & Alibert (2017) Planetesimal formation starts at the snow line // Astron. and Astrophys — 2017. — V. 608. — A92.
- 153. Stammler et al. (2017) Redistribution of CO at the location of the CO ice line in evolving gas and dust disks // Astron. and Astrophys 2017. V. 600. A140.
- 154. Krijt, Schwarz, Bergin, & Ciesla (2018) Transport of CO in Protoplanetary Disks: Consequences of Pebble Formation, Settling, and Radial Drift // Astrophys. J - 2018. - V. 864. - A78.

- 155. Wada et al. (2009) Collisional Growth Conditions for Dust Aggregates // Astrophys. J - 2009. - V. 702. - Pp. 1490-1501.
- 156. Okuzumi & Tazaki (2019) Nonsticky Ice at the Origin of the Uniformly Polarized Submillimeter Emission from the HL Tau Disk // Astrophys. J - 2019. - V. 878. - A132.
- 157. Banzatti et al. (2015) Direct Imaging of the Water Snow Line at the Time of Planet Formation using Two ALMA Continuum Bands // Astrophys. J. Let - 2015. - V. 815. - L15.
- 158. Okuzumi, Tanaka, Kobayashi, & Wada (2012) Rapid Coagulation of Porous Dust Aggregates outside the Snow Line: A Pathway to Successful Icy Planetesimal Formation // Astrophys. J – 2012. – V. 752. – A106.
- 159. Baillié, Charnoz, & Pantin (2015) Time evolution of snow regions and planet traps in an evolving protoplanetary disk // Astron. and Astrophys - 2015. - V. 577. - A65.
- 160. Shakura & Sunyaev (1973) Reprint of 1973A&A....24..337S. Black holes in binary systems. Observational appearance. // Astron. and Astrophys – 1973. – V. 500. – Pp. 33-51.
- 161. Stoyanovskaya, Vorobyov, & Snytnikov (2018) Analysis of Numerical Algorithms for Computing Rapid Momentum Transfers between the Gas and Dust in Simulations of Circumstellar Disks // Astronomy Reports – 2018. – V. 62. – Pp. 455-468.
- 162. Fraser, Collings, McCoustra, & Williams (2001) Thermal desorption of water ice in the interstellar medium // Monthly Notices Roy. Astron. Soc - 2001. - V. 327. - Pp. 1165-1172.
- 163. Oberg et al. (2005) Competition between CO and N₂ Desorption from Interstellar Ices // Astrophys. J. Let 2005. V. 621. Pp. L33-L36.

- 164. Bisschop et al. (2006) Desorption rates and sticking coefficients for CO and N₂ interstellar ices // Astron. and Astrophys - 2006. - V. 449. -Pp. 1297-1309.
- 165. Tielens & Allamandola (1987) Composition, Structure, and Chemistry of Interstellar Dust // Interstellar Processes — 1987. — V. 134. — A397.
- 166. Cuppen et al. (2017) Grain Surface Models and Data for Astrochemistry // Space Sci. Rev. - 2017. - V. 212. - Pp. 1-58.
- 167. Westley, Baragiola, Johnson, & Baratta (1995) Photodesorption from low-temperature water ice in interstellar and circumsolar grains // Nature - 1995. - V. 373. - Pp. 405-407.
- 168. Walmsley, Pineau des Forêts, & Flower (1999) Silicon chemistry in PDRs
 // Astron. and Astrophys 1999. V. 342. Pp. 542-550.
- 169. Murga et al. (2020) Experimental and theoretical studies of photoinduced reactions in the solid phase of the interstellar medium // Russian Chemical Reviews - 2020. - V. 89. - Pp. 430-448.
- 170. Draine (1978) Photoelectric heating of interstellar gas. // Astrophys. J.
 Suppl 1978. V. 36. Pp. 595-619.
- 171. Pavlyuchenkov, Akimkin, Wiebe, & Vorobyov (2019) Revealing dust segregation in protoplanetary discs with the help of multifrequency spectral index maps // Monthly Notices Roy. Astron. Soc — 2019. — V. 486. — Pp. 3907-3914.
- 172. Brown & Charnley (1990) Chemical models of interstellar gas-grain processes. I. Modelling and the effect of accretion on gas abundances and mantle composition in dense clouds. // Monthly Notices Roy. Astron. Soc - 1990. - V. 244. - P. 432.

- 173. Pringle (1981) Accretion discs in astrophysics // An. Rev. Astron. Astrophys - 1981. - V. 19. - Pp. 137-162.
- 174. Oberg et al. (2011) The Spitzer Ice Legacy: Ice Evolution from Cores to Protostars // Astrophys. J - 2011. - V. 740. - A109.
- 175. Yang, Mac Low, & Johansen (2018) Diffusion and Concentration of Solids in the Dead Zone of a Protoplanetary Disk // Astrophys. J - 2018. -V. 868. - A27.
- 176. Gundlach & Blum (2015) The Stickiness of Micrometer-sized Water-ice Particles // Astrophys. J − 2015. − V. 798. − A34.
- 177. Musiolik & Wurm (2019) Contacts of Water Ice in Protoplanetary Disks—Laboratory Experiments // Astrophys. J — 2019. — V. 873. — A58.
- 178. Weidenschilling (1977) Aerodynamics of solid bodies in the solar nebula.
 // Monthly Notices Roy. Astron. Soc 1977. V. 180. Pp. 57-70.
- 179. Kratter & Lodato (2016) Gravitational Instabilities in Circumstellar Disks
 // An. Rev. Astron. Astrophys 2016. V. 54. Pp. 271-311.
- 180. Toomre (1964) On the gravitational stability of a disk of stars. // Astrophys. J 1964. V. 139. Pp. 1217-1238.
- 181. Johnson & Gammie (2003) Nonlinear Outcome of Gravitational Instability in Disks with Realistic Cooling // Astrophys. J - 2003. -V. 597. - Pp. 131-141.
- 182. Rafikov (2005) Can Giant Planets Form by Direct Gravitational Instability? // Astrophys. J. Let - 2005. - V. 621. - Pp. L69-L72.
- 183. van Dishoeck & Black (1988) The Photodissociation and Chemistry of Interstellar CO // Astrophys. J - 1988. - V. 334. - P. 771.

- 184. Vorobyov & Basu (2015) Variable Protostellar Accretion with Episodic Bursts // Astrophys. J − 2015. − V. 805. − A115.
- 185. Ros & Johansen (2013) Ice condensation as a planet formation mechanism // Astron. and Astrophys - 2013. - V. 552. - A137.
- 186. Ros, Johansen, Riipinen, & Schlesinger (2019) Effect of nucleation on icy pebble growth in protoplanetary discs // Astron. and Astrophys — 2019. — V. 629. — A65.
- 187. Cuzzi, Davis, & Dobrovolskis (2003) Blowing in the wind. II. Creation and redistribution of refractory inclusions in a turbulent protoplanetary nebula // Icarus - 2003. - V. 166. - Pp. 385-402.
- 188. van't Hoff et al. (2020) Temperature Structures of Embedded Disks: Young Disks in Taurus Are Warm // Astrophys. J - 2020. - V. 901. - A166.
- 189. Eistrup, Walsh, & van Dishoeck (2018) Molecular abundances and C/O ratios in chemically evolving planet-forming disk midplanes // Astron. and Astrophys - 2018. - V. 613. - A14.
- 190. Schwarz et al. (2018) Unlocking CO Depletion in Protoplanetary Disks.
 I. The Warm Molecular Layer // Astrophys. J 2018. V. 856. A85.
- 191. Schwarz et al. (2019) Unlocking CO Depletion in Protoplanetary Disks.
 II. Primordial C/H Predictions inside the CO Snowline // Astrophys. J 2019. V. 877. A131.
- 192. Booth & Ilee (2019) Planet-forming material in a protoplanetary disc: the interplay between chemical evolution and pebble drift // Monthly Notices Roy. Astron. Soc - 2019. - V. 487. - Pp. 3998-4011.

193. Krijt et al. (2020) CO Depletion in Protoplanetary Disks: A Unified Picture Combining Physical Sequestration and Chemical Processing // Astrophys. J - 2020. - V. 899. - A134.

Приложение 1

Таблица 4.1: Усреднённое по диску полное содержание соединений на поверхности пылинок $\overline{X_i} = 10^{\overline{x_i}}$ и их параметр разброса s_i в порядках величины.

Название	$\overline{X_i}$	s_i	Название	$\overline{X_i}$	s_i
iSiO	8.1×10^{-10}	0.20	$\mathrm{iC_5H_2}$	3.3×10^{-10}	0.39
iCO ₂	1.7×10^{-5}	0.26	iCl	2.9×10^{-10}	0.40
iFeH	1.9×10^{-9}	0.26	iH ₂ O	5.1×10^{-5}	0.40
iMgH ₂	4.4×10^{-9}	0.28	iNaH	9.5×10^{-10}	0.43
iC_2H_4	3.0×10^{-10}	0.28	iNH ₃	6.6×10^{-6}	0.46
iHNC	1.1×10^{-8}	0.29	iH ₂ O ₂	5.2×10^{-8}	0.49
iHNCO	3.5×10^{-9}	0.34	iC_3S	7.3×10^{-11}	0.49
iSiH ₄	3.8×10^{-9}	0.35	iC_6H_2	9.4×10^{-11}	0.49
iP	7.6×10^{-11}	0.36	iNH ₂ OH	7.8×10^{-10}	0.53
iHCN	9.8 × 10 ⁻⁷	0.37	iN ₂	6.8×10^{-7}	0.55
iHCl	2.4×10^{-10}	0.38	iCO	3.2×10^{-6}	0.58
продолжение следует					

продолжение					
Название	$\overline{X_i}$	s_i	Название	$\overline{X_i}$	s_i
$\mathrm{iH}_2\mathrm{S}$	$2.3 imes 10^{-8}$	0.59	$\mathrm{iC}_{5}\mathrm{H}_{4}$	$7.6 imes 10^{-8}$	0.73
iC_3H_2	1.2×10^{-9}	0.60	$\mathrm{iC}_{2}\mathrm{H}_{6}$	$7.3 imes 10^{-7}$	0.74
$\mathrm{iC}_{2}\mathrm{H}_{2}$	9.5×10^{-11}	0.61	$\mathrm{iN}_{2}\mathrm{H}_{2}$	2.3×10^{-11}	0.76
iCH ₃ CN	1.1×10^{-9}	0.62	iH ₂ CS	4.5×10^{-9}	0.81
$\mathrm{iC}_3\mathrm{H}_4$	6.7×10^{-7}	0.65	іНСООН	1.6×10^{-8}	0.82
iPO	1.2×10^{-11}	0.65	$\mathrm{iC}_{9}\mathrm{H}_{4}$	2.2×10^{-9}	0.83
iHC ₃ N	2.1×10^{-11}	0.65	$\mathrm{iCH}_5\mathrm{N}$	9.6×10^{-9}	0.83
$\mathrm{iC_7H_2}$	$1.9 imes 10^{-11}$	0.66	$\mathrm{iC}_{9}\mathrm{H}_{2}$	6.3×10^{-11}	0.84
$\mathrm{iC}_8\mathrm{H}_4$	1.0×10^{-9}	0.66	iO ₃	2.7×10^{-9}	0.85
$\mathrm{iC_4N}$	1.5×10^{-11}	0.67	iHS ₂	2.3×10^{-10}	0.86
$\mathrm{iH_3C_5N}$	3.2×10^{-11}	0.69	$\mathrm{iC}_{6}\mathrm{H}_{4}$	1.8×10^{-8}	0.88
iCH ₃ OH	5.2×10^{-8}	0.69	iN_2O	1.1×10^{-11}	0.92
$\mathrm{iC}_8\mathrm{H}_2$	1.6×10^{-11}	0.70	iC_6H_6	2.1×10^{-11}	0.94
$\mathrm{i}\mathrm{H}_5\mathrm{C}_3\mathrm{N}$	2.2×10^{-10}	0.71	iH_2S_2	5.1×10^{-10}	0.96
$\mathrm{iC_7H_4}$	1.9×10^{-9}	0.72	iH ₂ CO	6.6×10^{-8}	0.96
iCH ₄	5.3×10^{-6}	0.73	iH ₂	1.1×10^{-7}	0.96
продолжение следует					

продолжение					
Название	$\overline{X_i}$	s_i	Название	$\overline{X_i}$	s_i
iH ₂ C ₃ O	4.6×10^{-10}	0.99	iCH ₃ OCH ₃	1.9×10^{-11}	1.52
$\mathrm{iCH}_3\mathrm{C}_4\mathrm{H}$	8.0×10^{-11}	1.05	iC_2H_5OH	2.0×10^{-11}	1.53
iNH ₂ CHO	2.3×10^{-9}	1.10	iOH	5.0×10^{-10}	1.56
iCH ₂ CO	1.7×10^{-9}	1.17	iCH ₃ CHO	2.3×10^{-9}	1.57
iHNO	3.3×10^{-9}	1.29	iCH ₃	3.1×10^{-11}	1.60
iO ₂	7.6×10^{-10}	1.32	iCH ₂	3.0×10^{-11}	1.64
iS_2	4.0×10^{-10}	1.38	iCH	2.2×10^{-11}	1.75
iNH_2	2.3×10^{-11}	1.39	iO	1.3×10^{-10}	1.75
iNO	1.1×10^{-11}	1.49	iC	2.2×10^{-11}	1.86
iC_4H_4	4.3×10^{-10}	1.50	iH	2.4×10^{-9}	1.98

Приложение 2

Таблица 5.1: Изменение содержания некоторых молекул в диске во время вспышки $\log_{10}(A_2/A_1)$ в порядке убывания вспышечного содержания A_2 . Звёздочкой отмечены молекулы, сублимированные вспышкой с поверхности пыли, кругом — произведённые в газофазных процессах. Модели с крупной пылью.

Название		A_2	$\log_{10}(A_2/A_1)$		
Непосредственные индикаторы вспышки					
*	NH ₃	$1.1 \times 10^{-06} \dots 1.3 \times 10^{-05}$	1.72.0		
*	$\rm H_2CO$	$1.3 \times 10^{-07} \dots 1.4 \times 10^{-05}$	$-0.5 \dots 5.8$		
*	C_3H_4	$2.5 \times 10^{-07} \dots 1.7 \times 10^{-06}$	$2.3 \dots 3.2$		
*	C_2H_6	$2.7 \times 10^{-07} \dots 1.6 \times 10^{-06}$	1.93.3		
* 〇	CH ₃ OH	$4.5 \times 10^{-08} \dots 1.5 \times 10^{-06}$	$3.1 \dots 4.3$		
* 〇	НСООН	$2.7 \times 10^{-08} \dots 1.5 \times 10^{-07}$	3.23.8		
*	$\rm NH_2OH$	$5.4 \times 10^{-09} \dots 3.4 \times 10^{-08}$	4.96.2		
*	CH ₃ CHO	$2.5 \times 10^{-10} \dots 1.1 \times 10^{-07}$	$3.7 \dots 6.1$		
продолжение следует					

продолжение					
Название		A_2	$\log_{10}(A_2/A_1)$		
*	$\mathrm{H}_{5}\mathrm{C}_{3}\mathrm{N}$	$2.0 \times 10^{-09} \dots 1.2 \times 10^{-08}$	2.72.9		
* ()	C_6H_4	$2.5 \times 10^{-09} \dots 1.6 \times 10^{-08}$	2.73.2		
\bigcirc	$\mathrm{HC}_{5}\mathrm{N}$	$1.9 \times 10^{-12} \dots 8.4 \times 10^{-09}$	2.64.3		
*	CH ₃ OCH ₃	$1.7 \times 10^{-11} \dots 3.4 \times 10^{-08}$	2.53.3		
\bigcirc	$\mathrm{HC}_{7}\mathrm{N}$	$3.1 \times 10^{-13} \dots 9.2 \times 10^{-09}$	3.36.1		
*	H_2S_2	$1.0 \times 10^{-09} \dots 5.5 \times 10^{-09}$	1.73.3		
* ()	$\rm CH_5N$	$1.3 \times 10^{-09} \dots 4.7 \times 10^{-08}$	2.12.8		
\bigcirc	$\mathrm{HC}_3\mathrm{N}$	$1.2 \times 10^{-10} \dots 5.9 \times 10^{-09}$	0.72.0		
*	HCOOCH ₃	$4.4 \times 10^{-10} \dots 1.6 \times 10^{-08}$	6.77.6		
Наблюдаемые в дисках молекулы					
* ()	СО	$8.0 \times 10^{-05} \dots 9.9 \times 10^{-05}$	0.00.2		
*	$\rm CO_2$	$8.4 \times 10^{-06} \dots 3.8 \times 10^{-05}$	$-0.1 \dots 0.9$		
*	H_2O	$1.4 \times 10^{-05} \dots 1.1 \times 10^{-04}$	1.02.0		
\bigcirc	0	$3.0 \times 10^{-05} \dots 2.3 \times 10^{-04}$	$0.2 \dots 0.7$		
\bigcirc	C^+	$7.3 \times 10^{-07} \dots 5.1 \times 10^{-05}$	0.70.8		
*	HCN	$3.1 \times 10^{-08} \dots 1.7 \times 10^{-07}$	$0.5 \dots 1.7$		
продолжение следует					

продолжение					
Название		A_2	$\log_{10}(A_2/A_1)$		
0	C_2H_2	$8.7 \times 10^{-09} \dots 4.7 \times 10^{-08}$	$1.3 \dots 1.7$		
*	HNC	$1.5 \times 10^{-09} \dots 8.8 \times 10^{-09}$	0.81.8		
0	SO	$4.6 \times 10^{-09} \dots 1.6 \times 10^{-08}$	$-0.5\cdots -0.1$		
\bigcirc	ОН	$1.2 \times 10^{-08} \dots 7.3 \times 10^{-08}$	$0.1 \dots 2.1$		
* ()	C_3H_2	$3.2 \times 10^{-10} \dots 4.4 \times 10^{-09}$	2.63.7		
\bigcirc	CS	$1.5 \times 10^{-11} \dots 1.0 \times 10^{-10}$	-1.40.1		
\bigcirc	CN	$4.0 \times 10^{-11} \dots 1.5 \times 10^{-09}$	$-0.1 \dots 1.1$		
\bigcirc	C_2H	$2.6 \times 10^{-11} \dots 3.0 \times 10^{-10}$	$-0.3 \dots 0.7$		
\bigcirc	HCO^+	$1.6 \times 10^{-12} \dots 1.5 \times 10^{-11}$	$-1.3 \cdots - 0.1$		
\bigcirc	CH^+	$3.7 \times 10^{-13} \dots 1.6 \times 10^{-11}$	$0.4 \dots 1.1$		
\bigcirc	N_2H^+	$8.7 \times 10^{-16} \dots 8.0 \times 10^{-15}$	$-2.4\cdots-3.6$		