

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ АСТРОНОМИИ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

На правах рукописи

УДК 524.523

Борщева Екатерина Владимировна

**Процессы в адсорбированном веществе и их влияние на химическую
эволюцию дозвёздных ядер и протопланетных дисков**

1.3.1. Физика космоса, астрономия

**Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук**

Научный руководитель

д.ф.-м.н. Д.З. Вибе

Москва – 2024

Оглавление

Введение	4
 Глава 1. Вспышки светимости в протопланетных дисках: трёхфазная астрохимическая модель	 20
1.1 Введение	20
1.2 Описание модели и рассмотренные области диска	22
1.3 Результаты	27
1.3.1 Сравнение двух- и трёхфазной моделей на стадии облака	27
1.3.2 Сравнение двух- и трёхфазной моделей на стадии диска	31
1.4 Обсуждение результатов	47
1.4.1 Поведение и области проявления значимых индикаторов вспышки в различных моделях	50
1.4.2 Влияние отношения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ на число индикаторов вспышки	53
1.5 Заключение по Главе 1	59
1.6 Положение, выносимое на защиту по результатам первой главы	60
 Глава 2. Образование сложных органических молекул в дозвёздных ядрах: роль недиффузионной поверхностной химии	 62
2.1 Введение	62
2.2 Модель	65
2.2.1 Трёхфазный код с недиффузионной химией	65
2.2.2 Физическая модель ядра L1544, начальные условия и параметры химии	71
2.2.3 Обновления в сетке реакций	74

2.3	Результаты	79
2.3.1	Определение согласия результатов моделирования и наблюдательных данных	79
2.3.2	Результаты для модели с реактивной десорбцией по Гэрроду	83
2.3.3	Химические процессы на пике метанола в модели с реактивной десорбцией по Гэрроду	89
2.3.4	Сравнение с моделью, использующей реактивную де- сорбцию по Миниссале	96
2.3.5	Варьирование отношения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$	99
2.4	Обсуждение	101
2.4.1	Сравнение с предшествующей моделью и значение туннелирования сквозь барьеры диффузии	102
2.4.2	Некоторые значимые реакции	103
2.4.3	Распыление космическими лучами	105
2.5	Заключение по Главе 2	106
2.6	Положения, выносимые на защиту по результатам второй главы	108
	Заключение	109
	Литература	111
	Приложение 1	126
	Приложение 2	151

Введение

Космическая пыль является важной составляющей межзвёздной среды. В частности, на поверхности межзвёздных пылинок происходит богатый набор астрохимических процессов, в том числе при низких температурах. Например, самый обильный газофазный компонент в молекулярных облаках, H_2 , производится на пыли и затем поступает в газовую фазу. Между газовой фазой и ледяными мантиями пылевых частиц идёт постоянный обмен веществом посредством адсорбции и различных видов десорбции, в том числе путём выброса в газ доли продуктов поверхностных реакций. При низких температурах ядра пылинок могут покрываться многослойными ледяными мантиями, и химические процессы в поверхностных и глубинных слоях мантий, вообще говоря, могут различаться. Частицы из толщи мантии неспособны непосредственно десорбировать в газовую фазу, а химические реакции в толще мантии могут идти замедленно по сравнению с реакциями в её поверхностных слоях. Химия в ледяных мантиях пылевых частиц — один из ключевых компонентов современных астрохимических моделей.

Непосредственные наблюдения состава ледяных мантий пылинок возможны далеко не всегда, однако процессы десорбции различной природы способны существенно изменять состав газовой фазы, наблюдать которую гораздо проще. В частности, реактивная десорбция даже при температурах ниже 10 К, характерных для внутренних областей дозвёздных ядер, может поставлять в газовую фазу значительные количества метанола и других сложных органических соединений, образующихся на поверхности пылевых частиц. Особенно сильно от реакций, протекающих в ледяных мантиях пылинок, зависят химические процессы во время и после вспы-

шек светимости звезды на ранней стадии эволюции. Поэтому реалистичность предсказаний химического состава как газовой, так и твёрдой фазы в объектах межзвёздной среды может существенно зависеть от того, насколько детально мы рассматриваем процессы на поверхности пыли.

На ранних эволюционных стадиях большинство молодых звёзд раз в $2 - 5 \cdot 10^4$ лет или чаще испытывают вспышки светимости различной амплитуды, возможно, связанные с возрастанием темпа аккреции [1]. Усиление светимости достигает 1–2 порядков величины [2,3]. Подобные вспышки, вероятно, являются неотъемлемой частью эволюции планетных систем, однако количество известных объектов, находящихся в стадии вспышки (звёзд типа FU Ориона, или фуоров), не превышает двух десятков. Как для уточнения статистики, так и для выявления механизма (механизмов) роста светимости этот список важно расширить, включив в него протозвёзды, в которых вспышка завершилась в недавнем прошлом. Индикатором вспышки светимости, произошедшей несколько сотен лет назад, могут быть изменения химического состава окружающего звезду протопланетного диска. Одно из наиболее очевидных следствий вспышки состоит в том, что компоненты, находившиеся в ледяных мантиях космических пылинок, во время вспышки возгоняются в газовую фазу, и их наблюдения предоставляют возможность проверки предположений о поверхностных химических процессах, которые происходили во время спокойной (довспышечной) стадии эволюции протопланетного диска. В частности, вспышка позволяет наблюдать сложную органику, образующуюся на поверхности пыли (метанол, ацетон, ацетонитрил, ацетальдегид, метилформиат [4]).

В астрохимическом моделировании для описания процессов в адсорбированном веществе широко используется так называемый двухфазный подход, в котором твёрдая фаза рассматривается как целое, без учёта возможной многослойности ледяных мантий. В частности, такой подход применён в работах [5] и [6], где проводилось моделирование вспышек свети-

мости фуоров для выявления вероятных индикаторов вспышечной активности. Однако это представление может оказаться слишком упрощённым, так как значимые реакции в адсорбированном веществе в рамках диффузионного механизма (Лэнгмюра-Хиншельвуда) эффективно происходят только на поверхности мантии, но не в её толще (за исключением реакций с участием атомарного и молекулярного водорода). Пренебрежение этим фактом может привести к искажению химического состава льда в двухфазных моделях.

Различие между поверхностными и глубинными слоями ледяной мантии пыли вводится в так называемых трёхфазных астрохимических моделях, где отдельно рассматривается адсорбированное вещество, непосредственно контактирующее с газовой фазой (поверхностное вещество), и вещество глубинных слоёв мантии. Первые подобные модели были описаны в работе [7], а дальнейшее развитие они получили, например, в работах [8–10]. В настоящей работе трёхфазная модель, схожая с упомянутыми, реализована для исследования химии вспышек светимости в протопланетных дисках и химической эволюции дозвёздных ядер.

Сложные органические молекулы (СОМ) — углеродсодержащие химические соединения с числом атомов не менее шести — детектируются на всех стадиях звездообразования. Их обнаружение в холодных тёмных ядрах, самых ранних стадиях формирования маломассивных звёзд, оказалось неожиданным. Вероятно, впервые о наличии СОМ в беззвёздном (starless) ядре упоминалось в работе [11], где сообщали об обнаружении пропилена CH_2CHCH_3 в молекулярном облаке Тельца ТМС-1. Кислородсодержащие СОМ в холодных плотных ядрах были найдены в 2012 году [12, 13]. За последнее десятилетие СОМ обнаружены во многих дозвёздных ядрах на разных стадиях развития, начиная от самых молодых L1521E [14, 15] и L1517B [16], переходя к более развитому ядру L1498 [17] и заканчивая ядром L1544, которое считается наиболее проэволюционировавшим дозвёзд-

ным ядром [18, 19]. Более того, недавно были предприняты попытки установить эволюционную последовательность дозвёздных ядер [16]. Различный эволюционный статус, возможно, объясняет наблюдаемую разницу в концентрациях СОМ между ядрами. Таким образом, сейчас можно утверждать, что СОМ повсеместно распространены на ранних стадиях эволюции в областях формирования маломассивных звёзд.

За последние десятилетия было предложено несколько сценариев, объясняющих присутствие СОМ в холодном плотном молекулярном газе: основанные на роли космических лучей, кинетике Элея–Ридеала, поверхностных реакциях вставки углерода (carbon insertion reactions) — см., например, [20–22]. В целом, большинство предложенных сценариев можно разделить на два класса, основываясь на том, газофазная или поверхностная химия отвечает за образование СОМ. Первый предложенный сценарий [23] предполагал газофазное образование СОМ из прекурсоров, сформированных на поверхности пыли (метанол). Модель [23] и её расширенная версия [10] частично имели успех в объяснении наблюдаемых концентраций СОМ в L1689b и B1-b, а также обилий и пространственного распределения СОМ в ядре L1544. Тем не менее, этот сценарий столкнулся с некоторыми трудностями. Во-первых, в рамках его наблюдалось перепроизводство метанола в газовой фазе. Во-вторых, при применении к другим, предположительно менее проэволюционировавшим дозвёздным ядрам, модель не воспроизводила наблюдаемые концентрации СОМ (например, [15]). Наконец, хотя это и не относится напрямую к формированию СОМ в газовой фазе, модель [10] не смогла воспроизвести достаточные концентрации CO_2 во льду для статичного профиля физических условий в ядре L1544, взятого из [24]. В этом профиле температура пыли в центре ядра опускается ниже 10 K, а на его внешнем крае она достигает приблизительно 15 K. Согласно [25], CO_2 — один из главных компонентов ледяных мантий с концентрацией 20% по отношению к водяному льду (хотя не вполне ясно, со-

храняются ли подобные концентрации во внутренних областях холодных плотных ядер). Подобное отношение содержаний льда CO_2 и водяного льда (10–20%) в тёмных межзвёздных облаках было обнаружено и в программе Ice Age [26, 27].

Было показано (см., например, [28]), что как минимум при определённых предположениях СОМ в холодном газе могут формироваться в газо-фазных химических реакциях, а роль химии на поверхности космической пыли в образовании СОМ при ~ 10 К в разных исследованиях оценивалась по-разному. В некоторых работах она считалась незначительной, тогда как более новые исследования предполагают, что химические процессы в ледяных мантиях играют определяющую роль [29].

Новый взгляд на поверхностную химию как на ключевой источник сложных органических молекул при низких температурах (~ 10 К) основан на экспериментальных данных [30] и [31]. В этих работах было показано, что сложные органические молекулы, содержащие несколько атомов углерода — такие как гликольальдегид, этиленгликоль и даже простейшая аминокислота глицин — эффективно образуются в лабораторных экспериментах с физическими условиями, подобными тем, что имеют место в холодных тёмных облаках. Однако эти результаты невозможно объяснить в рамках традиционной парадигмы поверхностной химии, которая базируется на предположении, что химические реакции на пыли идут посредством диффузионного механизма Лэнгмюра–Хиншельвуда. При 10 К только самые лёгкие частицы, такие как атомарный и молекулярный водород, будут достаточно мобильны в ледяных мантиях пылинок, чтобы индуцировать эффективные диффузионные химические реакции [32]. Таким образом, посредством диффузионной химии при 10 К и ниже могут происходить только реакции гидрирования. Реакции между радикалами, которые требуются для формирования сложных органических соединений, эффективно идут на пыли при $T \sim 30\text{--}40$ К [33] и неэффективны при 10 К, поскольку при

этой температуре радикалы неподвижны. Аналогично, неподвижны будут и атомы тяжелее водорода.

Одно из возможных объяснений экспериментальным результатам [30] и [31] — предположение, что химические реакции между радикалами, ведущие к образованию СОМ, всё же идут при 10 К, поскольку в некоторых случаях радикалы оказываются на поверхности вблизи друг друга как продукты других процессов, эффективных при 10 К. Подобные процессы включают в себя адсорбцию из газовой фазы, эффективные диффузионные поверхностные реакции, фотореакции и реакции, индуцированные космическими лучами. Таким образом, можно предположить, что химические реакции на пыли между близко расположенными неподвижными частицами могут происходить за рамками диффузионного механизма Лэнгмюра–Хиншельвуда, то есть недиффузионно. Это предположение открывает возможность для эффективных поверхностных реакций между радикалами при температурах пыли ≤ 10 К. В результате сложные органические молекулы, а также другие соединения, которые не формируются при 10 К посредством диффузионной химии (например CO_2), вероятно, могут эффективно образовываться в недиффузионных химических реакциях. В настоящей диссертационной работе недиффузионные механизмы реакций в ледяных мантиях пылинок реализованы в астрохимическом коде и применены для моделирования химического состава дозвёздного ядра L1544.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, двух глав и заключения. Число страниц в диссертации 152, рисунков 15, таблиц 17. Список литературы содержит 122 наименования.

Во **Введении** представлен краткий обзор предмета исследования и содержания диссертационной работы. Описаны актуальность диссертационной работы, её цели и задачи, новизна полученных результатов, а также

их научная и практическая значимость. Дана информация об апробации результатов, научных публикациях по итогам исследований и вкладе автора в работу.

В **Главе 1** рассмотрено влияние многослойной структуры ледяных мантий космических пылинок на химические процессы, происходящие в них до, во время и после вспышек светимости в протопланетных дисках. Моделирование проводилось астрохимическим кодом PRESTA, разработанным в Институте астрономии РАН. Показано, что на стадии, предшествующей формированию диска, рассмотрение различий между поверхностью и толщей мантии не столь значимо, однако после образования диска учёт особенностей химических процессов в различных слоях мантии становится более существенным. В частности, в трёхфазной астрохимической модели (газ, поверхность мантии, толща мантии) по сравнению с двухфазной моделью увеличивается количество потенциальных индикаторов вспышки, сохраняющих “нетипичные” содержания на протяжении сотен лет после окончания вспышки. Единственным соединением, которое чувствительно к вспышке в двухфазной модели и нечувствительно к ней в трёхфазной, оказывается адсорбированный формамид.

В разделе 1.1 отмечается значимость поиска индикаторов вспышек светимости молодых солнцеподобных звёзд и введения многослойной структуры пылевых мантий. В разделе 1.2 описывается используемая астрохимическая модель и внесённые в неё изменения. Затем сравниваются результаты, полученные для двух- и трёхфазной моделей (раздел 1.3) как на стадии молекулярного облака (раздел 1.3.1), так и на стадии протопланетного диска (раздел 1.3.2). Дается интерпретация полученным результатам (раздел 1.4) — в частности, обсуждается поведение значимых индикаторов вспышки светимости в настоящей и предыдущих аналогичных работах (раздел 1.4.1), а также оговаривается роль отношения барьера диффузии (E_{diff}) к барьеру десорбции (E_{des}) для частиц на поверхности пыли (раз-

дел 1.4.2). В разделе 1.5 перечислены основные итоги исследования.

В **Главе 2** представлены результаты астрохимического моделирования сложных органических молекул (СОМ) в твёрдой и газовой фазах дозвёздного ядра L1544. Обновлённая модель MONACO, основанная на уравнениях химической кинетики, включает в себя недиффузионные процессы, новые пути образования ацетальдегида и метана во льду, а также изменение энергии десорбции Н и Н₂ в соответствии с долей поверхности пылинки, покрытой молекулами Н₂. Результаты моделирования находятся в согласии с наблюдательными данными. Показано, что реакции на поверхности пыли между такими радикалами, как СН₃, СН₃О и НСО, эффективно протекают в недиффузионном режиме и играют ключевую роль в формировании СОМ во льду. В газовую фазу СОМ доставляются посредством реактивной десорбции, которая усиливается благодаря поверхностным реакциям присоединения и абстракции водорода. По результатам моделирования концентрации СОМ во льду находятся в диапазоне 1%–2% (метилформиат) либо нескольких десятых процента (ацетальдегид, диметиловый эфир) по отношению к водяному льду. Обнаружено, что на газофазные концентрации СОМ существенно влияет выбор параметризации для эффективности реактивной десорбции. Также предложены ограничения для отношения энергии диффузии поверхностных частиц к их энергии десорбции.

Раздел 2.1 посвящён актуальности изучения химического состава дозвёздных ядер, а также проблемам исследования химических процессов на поверхности пыли, в частности, реактивной десорбции. В разделе 2.2 описаны используемая модель и внедрённые в код MONACO изменения, в том числе недиффузионная химия в ледяных мантиях пылевых частиц (раздел 2.2.1), физические условия в ядре L1544 и параметры моделирования (раздел 2.2.2), изменения в сетке химических реакций (раздел 2.2.3). Далее в разделе 2.3 даны результаты исследования: определение согласия мо-

дельных и наблюдаемых содержаний (раздел 2.3.1), обилия СОМ в основной модели, использующей интерпретацию реактивной десорбции по Гэрроду (раздел 2.3.2), а также химические процессы, приводящие к ним (раздел 2.3.3), сравнение с моделью, в которую внедрена реактивная десорбция по Миниссале (раздел 2.3.4), и результаты для сетки моделей по $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ (раздел 2.3.5). В разделе 2.4 обсуждаются роль туннелирования сквозь барьеры диффузии для атомарного и молекулярного водорода и сравнение с предыдущей реализацией кода MONACO (раздел 2.4.1), влияние параметров ключевых реакций на результаты моделирования (раздел 2.4.2), внедрение распыления космическими лучами как одного из типов десорбции (раздел 2.4.3). В разделе 2.5 суммируются ключевые результаты данной главы.

В **Заключении** представлены основные результаты диссертационной 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

1. Исследование влияния многослойной структуры ледяных мантий межзвёздных пылинок на химические процессы, происходящие в них до, во время и после вспышек светимости в протопланетных дисках.
2. Изучение влияния недиффузионных химических процессов в многослойных ледяных мантиях пылинок на формирование сложных органических молекул в газе и во льду в условиях, типичных для самых ранних стадий образования маломассивных звёзд.

Задачи

1. Внедрение трёхфазной химии в астрохимический код.

2. Проведение расчётов химического состава для условий молекулярного облака и некоторых областей протопланетного диска с целью поиска потенциальных индикаторов вспышек светимости.
3. Сравнение результатов поиска для двух- и трёхфазной модели.
4. Внедрение описания недиффузионных химических процессов в трёхфазный астрохимический код.
5. Проведение расчётов химического состава в условиях дозвёздного ядра L1544 с целью получить результаты, близкие к наблюдательным данным по сложным органическим соединениям в газовой фазе.
6. Анализ химических процессов, приводящих к формированию сложных органических соединений в газовой и твёрдой фазе ядра L1544, а также основных компонентов ледяных мантий.
7. Исследование некоторых видов десорбции вещества с поверхности космической пыли: реактивной десорбции, распыления (sputtering) космическими лучами.
8. Расчёт сетки моделей по отношению энергии диффузии химических соединений к их энергии десорбции на поверхности пылевых частиц, выбор среди них модели с оптимальными параметрами.

Научная новизна

В данной диссертационной работе впервые проведено сравнение потенциальных индикаторов вспышек светимости в протопланетном диске для двух- и трёхфазной астрохимических моделей. Впервые с помощью астрохимической модели, включающей в себя недиффузионные процессы на пыли, успешно воспроизведены наблюдаемые обилия сложных органических соединений (CH_3OH , CH_3CHO , CH_3OCH_3 , HCOOCH_3 , NH_2CHO),

а также их радиальные распределения и положение пика метанола в дозвёздном ядре L1544. Показано, что сложные органические молекулы могут образовываться на поверхности пылевых частиц и доставляться в газ путём реактивной десорбции, эффективность которой должна составлять $\sim 0.1\%$. Показано, что в ядре L1544 содержания сложных органических соединений в твёрдой фазе составляют 0.1–3% по отношению к водяному льду. Этот результат находится в согласии с наблюдениями сложных органических молекул в газовой фазе горячих ядер и ядрышек. Впервые рассчитана сетка моделей с варьированием отношения энергии диффузии поверхностных частиц к их энергии десорбции и выявлено значение данного параметра, при котором достигается наилучшее согласие с наблюдениями и наиболее физичный состав льда.

Научная и практическая значимость

Предложенные списки индикаторов вспышек светимости в протопланетных дисках могут использоваться для выявления молодых звёзд типа FU Ориона, испытывавших усиление темпов аккреции вещества диска на них в недавнем прошлом. Обнаружение (или отсутствие обнаружения) тех индикаторов, которые были выявлены в трёхфазной модели, но не в двухфазной, позволит подтвердить (или опровергнуть) значимость многослойной структуры пылевых мантий для моделирования химических процессов в молекулярных облаках и протопланетных дисках.

Астрохимическую модель с включёнными в неё недиффузионными процессами в ледяных мантиях пылинок и сеткой реакций, обновлённой согласно новым теоретическим и экспериментальным данным, можно применять с целью дальнейшего теоретического исследования химической композиции объектов межзвёздной среды. Результаты моделирования состава льда в дозвёздном ядре L1544 могут использоваться как референсные для наблюдений.

Методология и методы исследования

Задачи диссертации решались при помощи численного моделирования астрохимическими кодами PRESTA [34] и MONACO [10]. Расчёты проводились на сервере Научной лаборатории астрохимических исследований Уральского федерального университета им. Б. Н. Ельцина. Результаты анализировались с помощью авторского программного обеспечения.

Достоверность представленных результатов

Достоверность представленных в работе результатов моделирования подтверждается сравнением с теоретическими и наблюдательными данными других авторов, а также обсуждением полученных результатов на научных конференциях и семинарах. Результаты опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК.

Личный вклад автора

Автор лично участвовал в постановке задач, написании кода, проводил расчёты и обрабатывал результаты численных экспериментов, совместно с соавторами участвовал в обсуждении результатов и формулировке выводов.

В частности, автором:

1. Внедрена в код PRESTA модель трёхфазной химии.
2. Внедрено в код MONACO описание недиффузионных процессов в адсорбированном веществе.
3. Реализован в коде MONACO модуль для расчёта распыления (sputtering) космическими лучами вещества ледяных мантий.
4. Переработан модуль расчёта реактивной десорбции в коде MONACO.

5. Выполнены все расчёты кодами PRESTA и MONACO.
6. Разработаны методы анализа и визуализации результатов моделирования.
7. Детально исследован широкий диапазон параметров в моделировании химического состава дозвёздного ядра кодом MONACO, среди них определены оптимальные.
8. Дано описание ключевых химических процессов, влияющих на концентрации изучаемых соединений.
9. Написан основной текст работ [A1] и [A2].

Положения, выносимые на защиту

- Показано, что трёхфазная астрохимическая модель, в отличие от двухфазной, позволяет добиться близких к наблюдаемым концентраций основных углеродсодержащих компонентов ледяных мантий ($i\text{CO}$, $i\text{CO}_2$, $i\text{CH}_3\text{OH}$) на стадии моделирования молекулярного облака. Показано, что во внешних областях протопланетного диска трёхфазная модель предлагает большее количество потенциальных индикаторов произошедшей вспышки светимости, чем двухфазная.
- Впервые успешно воспроизведены содержания газофазных сложных органических соединений (CH_3OH , CH_3CHO , CH_3OCH_3 , HCOOCH_3 , NH_2CHO), а также положение пика концентрации метанола в дозвёздном ядре L1544 моделью, включающей в себя недиффузионные химические процессы в ледяных мантиях пылинок. Показано, что сложные органические молекулы могут образовываться в поверхностных реакциях и доставляться в газовую фазу посредством реактивной десорбции с эффективностью $\sim 0.1\%$.

- Показано, что содержания твердофазных сложных органических соединений в дозвёздном ядре L1544 составляют 0.1–3% по отношению ко льду H_2O , что согласуется с наблюдательными данными по этим соединениям в газовой фазе горячих ядер и ядрышек. Выявлено отношение барьера диффузии частиц на поверхности пыли к их энергии десорбции, при котором достигается наилучшее согласие с наблюдательными данными и наиболее физичная композиция льда.

Апробация

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

1. Конференция молодых учёных ИНАСАН (ИНАСАН, Москва, 24 октября 2019);
2. Конференция молодых учёных ИНАСАН (ИНАСАН, Москва, 05 ноября 2020);
3. Семинар по межзвёздной среде, посвящённый 100-летию В.Г. Горбачёвского (онлайн, 27 мая 2020);
4. Всероссийская с международным участием научная конференция студентов и молодых учёных “Астрономия и исследование космического пространства” (онлайн, 1–5 февраля 2021);
5. Всероссийская конференция “Звздообразование и планетообразование” (АКЦ ФИАН, Москва + онлайн, 23–24 ноября 2021);
6. Семинар Научной лаборатории астрохимических исследований УрФУ (УрФУ, Екатеринбург, 17 февраля 2022);
7. Конференция молодых учёных ИНАСАН (ИНАСАН, Москва, 09 ноября 2023);

8. The 3d International Conference on Physics and Chemistry of Combustion and Processes in Extreme Environments (Samara, July 2–6, 2024).

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] ***Borshcheva E. V., Wiebe D. S.*** Luminosity Outbursts in Protoplanetary Discs: A Three-Phase Astrochemical Model // *Astronomy Reports*. — 2022. — V. 66. — No. 5. — Pp. 393-418.
- [A2] ***Katerina V. Borshcheva, Gleb S. Fedoseev, Anna F. Punanova, Paola Caselli, Izaskun Jiménez-Serra, and Anton I. Vasyunin.*** Formation of Complex Organic Molecules in Prestellar Cores: The Role of Non-Diffusive Grain Chemistry // submitted to *The Astrophysical Journal*.
- [A3] *Izaskun Jiménez-Serra, Andrés Megías, Joseph Salaris, Herma Cuppen, Angéle Taillard, Miwha Jin, Valentine Wakelam, Anton I. Vasyunin, Paola Caselli, Yvonne J. Pendleton, Emmanuel Dartois, Jennifer A. Noble, Serena Viti, **Katerina Borshcheva**, Robin T. Garrod, and Ice Age collaboration.* Modelling CH₃OH and hydride formation in the JWST Ice Age era // submitted to *Astronomy & Astrophysics*.
- [A4] ***Борщева Е. В., Вубе Д. З.*** Астрохимические базы данных как источник неопределённости при моделировании // *Научные труды Института астрономии РАН. Том 4.* — 2019. — Т. 4 — С. 61-66.

Другие публикации автора по теме диссертации

- [B1] ***Е. В. Борщева.*** Трёхфазный астрохимический код: моделирование состава молекулярного облака // *Сборник научных трудов Всероссийской с международным участием научной конференции студентов*

и молодых учёных, посвящённой памяти П. Е. Захаровой. — 2021. — С. 93-96.

Глава 1. Вспышки светимости в протопланетных дисках: трёхфазная астрохимическая модель

1.1. Введение

Протопланетный диск — это уплощённый газопылевой объект, который формируется вокруг молодой звезды в процессе коллапса молекулярного облака. Соответственно, протопланетные диски наследуют вещество молекулярных облаков, однако их химический состав продолжает эволюционировать и претерпевает значительные изменения. В частности, существенное влияние на него могут оказывать вспышки светимости, которые испытывает звезда на ранних стадиях эволюции [1].

Благодаря вспышкам светимости молодых звёзд вещество ледяных мантий пылинок десорбирует и оказывается в газовой фазе. Наблюдения газофазных соединений позволяют проверить предположения о химических процессах, которые происходили в твёрдой фазе вещества протопланетного диска до начала вспышки. Однако химия вспышки светимости не ограничивается испарением ледяных мантий. Появление испарившихся молекул в газовой фазе инициирует новые цепочки химических процессов. Например, одно из наиболее изученных следствий вспышки — испарение льда CO — приводит к разрушению N_2H^+ в процессе формирования HCN^+ [35, 36]. Результаты реализации этих цепочек могут наблюдаться и после завершения вспышки.

В работах [5] и [6] было проведено моделирование вспышек светимости флуоров с целью выявления возможных индикаторов вспышечной активности, длительное время после вспышки сохраняющих содержания, нетипичные для спокойной фазы. В [5] в качестве подобных индикаторов

были предложены органические соединения, в частности, метилформиат HCOOCH_3 , ацетонитрил CH_3CN , кетен CH_2CO , адсорбированный гидроксиламин $i\text{NH}_2\text{OH}$, а также CO и CO_2 в отдалённых областях диска (здесь и далее префиксом “i” обозначены адсорбированные компоненты). Нетипичное поведение также было обнаружено у бензолового льда $i\text{C}_6\text{H}_6$: в отличие от многих других льдов, которые испарялись во время вспышки и достаточно быстро восстанавливались после неё, бензоловый лёд аккумулировался в мантиях пылинок во время и после вспышки, отчего его содержание после вспышки превышало довыспышечный уровень на порядки величины. В работе [6] в качестве индикатора прошлой вспышки светимости, долго сохраняющего аномальные поствыспышечные содержания, был, в частности, предложен формальдегид H_2CO .

Астрохимическая модель в обеих упомянутых работах [5, 6] была двухфазной: отдельно рассматривались газ и вещество мантии пыли, без дифференциации на поверхностные и глубинные слои. В такой постановке задачи не учитывается замедление диффузионных реакций в толще ледяной мантии, что может привести к перепроизводству одних молекул и недостаточному производству других. Это было отмечено в работе [5]: в конце стадии молекулярного облака основным углеродсодержащим компонентом на поверхности пыли оказался метанол. Его доля по отношению к водяному льду составила более 30%, а содержания $i\text{CO}$ и $i\text{CO}_2$ по отношению к $i\text{H}_2\text{O}$ были равны 10^{-4} и 10^{-3} , соответственно. Это не вполне согласуется с наблюдательными данными. По результатам наблюдений протозвёздных объектов [25, 37] обилия адсорбированных CO и CO_2 по отношению к содержанию льда H_2O составляют порядка 10–30%, а содержание льда метанола ($i\text{CH}_3\text{OH}$) — всего 3–4%. Впрочем, в отдельных случаях наблюдаемое содержание льда метанола может составлять менее одного процента по отношению к водяному льду [38] или превышать 10% [25].

В базовой модели из работы [5] температура на стадии молекулярного

облака принималась равной 10 K, а длительность этой стадии составляла 10^6 лет. Чтобы приблизить соотношение обилий к наблюдаемым, рассматривался расчёт с более высокой температурой. Благодаря этому вместо метанола адсорбированные молекулы CO эффективно конвертировались в $i\text{CO}_2$, однако содержание $i\text{CO}$ на пыли при этом получалось чрезмерно низким. При уменьшении длительности стадии молекулярного облака адсорбированные молекулы CO не успевают конвертироваться в метанол, что решает проблему его избытка, но и содержание $i\text{CO}_2$ оказывается недостаточным. Ещё одна попытка сократить теоретическое содержание льда метанола была связана с добавлением в астрохимическую сетку реакции абстракции водорода $i\text{CH}_3\text{OH} + i\text{H} \rightarrow i\text{CH}_2\text{OH} + i\text{H}_2$, однако эта реакция имеет высокую энергию активации и при низких температурах, характерных для молекулярных облаков, сама по себе не оказывает значимого влияния на содержание метанола во льду. По итогам этих исследований авторами [5] было высказано предположение, что снижению эффективности синтеза метанола на пылинках будет способствовать введение многослойности мантии, где $i\text{CO}$ может сохраняться, не превращаясь в метанол, в глубинных слоях.

1.2. Описание модели и рассмотренные области диска

Следуя [5], в настоящей работе рассматриваются четыре стадии эволюции протопланетного диска. На первой — стадии молекулярного облака — формируется начальный химический состав диска. Параметры и продолжительность этой стадии варьировались; принятые значения обсуждаются в разделе 1.3. Затем следуют спокойная стадия эволюции диска длительностью 500 тыс. лет, фаза вспышки длительностью 100 лет и поствспышечная стадия.

В отличие от работы [5], мы рассматриваем только тёмный диск, без атмосферы. Чтобы отследить основные тенденции в химической эволю-

Таблица 1.1. Физические условия в рассмотренных областях диска

Область диска, расстояние до звезды	Фаза	$n(\text{H}_2), \text{см}^{-3}$	$T, \text{К}$	χ	$\zeta, \text{с}^{-1}$
Внутренняя (I), несколько а.е.	Спокойная	8×10^{11}	100	0	10^{-15}
	Вспышка	8×10^{11}	500	0	10^{-15}
Промежуточная (IM), ≈ 10 а.е.	Спокойная	2×10^{11}	50	0	10^{-16}
	Вспышка	2×10^{11}	200	0	10^{-16}
Внешняя (O), ≈ 100 а.е.	Спокойная	4×10^9	20	0	10^{-17}
	Вспышка	4×10^9	80	0	10^{-17}
Экстремально внешняя (EO), ≈ 250 а.е.	Спокойная	2×10^7	16	0	10^{-17}
	Вспышка	2×10^7	40	0	10^{-17}

ции, рассматриваются те же четыре типичных набора параметров, что и в упомянутой работе, с тем изменением, что для стадии молекулярного облака и для экстремально внешней области диска (за исключением времени вспышки) выбрана температура 16 К (см. ниже). Эти наборы параметров (см. таблицу 1.1) взяты из работы [39] и условно соответствуют внутренней, промежуточной, внешней и экстремально внешней областям типичного протопланетного диска.

В настоящей работе используется одноточечная астрохимическая модель PRESTA, базирующаяся на сетке химических реакций ALCHEMIC [34], аналогичная той, что применялась в работе [5], где можно увидеть более подробное её описание. В отличие от [5] в настоящей работе отдельно рассматриваются химические процессы на пыли, происходящие в толще ледяной мантии, и отдельно — процессы, которые идут в нескольких ближайших к поверхности слоях мантии, находящихся в непосредственном контакте с газовой фазой.

Используемая астрохимическая модель предполагает решение уравнений химической кинетики, где концентрации газофазных n_i^{gas} и адсорби-

рованных n_i^{sur} компонентов подчиняются соотношениям

$$\begin{aligned} \frac{dn_i^{\text{gas}}}{dt} = & \sum_{j,l} k_{jl}^{\text{gas}} n_j^{\text{gas}} n_l^{\text{gas}} - n_i^{\text{gas}} \sum_j k_{ij}^{\text{gas}} n_j^{\text{gas}} + \sum_j k_{\text{ext},j}^{\text{gas}} n_j^{\text{gas}} - \\ & - k_{\text{ext},i}^{\text{gas}} n_i^{\text{gas}} - k_{\text{ads},i} n_i^{\text{gas}} + k_{\text{des},i} n_i^{\text{sur}}, \quad (1.1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt} = & \sum_{j,l} k_{jl}^{\text{sur}} n_j^{\text{sur}} n_l^{\text{sur}} - n_i^{\text{sur}} \sum_j k_{ij}^{\text{sur}} n_j^{\text{sur}} + \sum_j k_{\text{ext},j}^{\text{sur}} n_j^{\text{sur}} - \\ & - k_{\text{ext},i}^{\text{sur}} n_i^{\text{sur}} + k_{\text{ads},i} n_i^{\text{gas}} - k_{\text{des},i} n_i^{\text{sur}}. \quad (1.2) \end{aligned}$$

Здесь k_{ij}^{gas} и k_{ij}^{gas} — коэффициенты скоростей реакций в газовой и твёрдой фазах между компонентами i и j , $k_{\text{ext},i}^{\text{gas}}$ и $k_{\text{ext},i}^{\text{sur}}$ — коэффициенты скоростей реакций, обусловленных влиянием внешних факторов (космические лучи, УФ-излучение), $k_{\text{ads},i}$ — коэффициент скорости адсорбции компонента с индексом i на космическую пыль, $k_{\text{des},i}$ — коэффициент скорости десорбции компонента i с пыли.

В трёхфазных моделях отдельно рассматриваются соединения на поверхности пыли (наследуя обозначения из уравнения (1.2), обозначим их концентрацию как n_i^{sur}) и компоненты глубинных слоёв мантии пыли (с концентрацией n_i^{bulk}) [7, 8]. Концентрации компонентов на поверхности пыли и в толще ледяной мантии подчиняются уравнениям, аналогичным уравнению (1.2), однако в уравнениях для толщи мантии отсутствуют слагаемые адсорбции и десорбции, поскольку обмен веществом между газовой и твёрдой фазами происходит только с поверхности пыли. В рассматриваемой модели поверхностное вещество составляют верхние пять слоёв ледяной мантии. Предполагается, что, как и в поверхностных слоях, движение частиц в толще мантии обусловлено тепловой диффузией. Соотношение энергетического барьера диффузии для компонента i в толще мантии и его энергии десорбции выбрано равным $E_{\text{swap},i}$: $E_{\text{des},i} = 0.7$ [9]. Посколь-

ку в нашей модели отношение барьера диффузии компонента i в поверхностных слоях ледяной мантии к его энергии десорбции составляет $E_{\text{diff},i}$: $E_{\text{des},i} = 0.5$, реакции в толще мантии будут идти замедленно по сравнению с поверхностью.

В результате химических реакций и обмена веществом с газовой фазой происходит обновление поверхностных слоёв пыли, поэтому в уравнения необходимо ввести слагаемые, обеспечивающие переопределение того, какие частицы считать находящимися на поверхности, а какие — в толще мантии. При увеличении общей концентрации вещества $n^{\text{sur}} = \sum_i n_i^{\text{sur}}$ на поверхности пыли (то есть в случае, когда $(dn^{\text{sur}}/dt)^{\text{chem}} = \sum_i (dn_i^{\text{sur}}/dt)^{\text{chem}} > 0$) концентрация компонента, перераспределяемого с поверхности пыли в толщу мантии [7], задаётся выражением

$$\left(\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt}\right)^{\text{tran}} = \alpha_{\text{ads}} \left(\frac{dn^{\text{sur}}}{dt}\right)^{\text{chem}} \cdot \frac{n_i^{\text{sur}}}{n^{\text{sur}}}. \quad (1.3)$$

Здесь $(dn_i^{\text{sur}}/dt)^{\text{chem}}$ — изменение концентрации поверхностного соединения i в результате химических реакций и взаимодействия с газовой фазой, $\alpha_{\text{ads}} = N^{\text{sur}}/N_{\text{S}}$ — отношение общего количества молекул на поверхности одной пылинки к среднему числу активных центров для адсорбции на пылинке, поверхностную плотность которых обычно принимают равной $\sim 10^{15} \text{ см}^{-2}$ (в нашей модели она принята равной $4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$).

В случае уменьшения общей концентрации вещества на поверхности пыли $((dn^{\text{sur}}/dt)^{\text{chem}} = \sum_i (dn_i^{\text{sur}}/dt)^{\text{chem}} < 0)$ перераспределение компонентов между толщей мантии и поверхностью пылинки определяется выражением

$$\left(\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt}\right)^{\text{tran}} = \alpha_{\text{des}} \left(\frac{dn^{\text{sur}}}{dt}\right)^{\text{chem}} \cdot \frac{n_i^{\text{bulk}}}{n^{\text{bulk}}}. \quad (1.4)$$

Здесь $n^{\text{bulk}} = \sum_i n_i^{\text{bulk}}$ — суммарная концентрация вещества в толще мантии, $\alpha_{\text{des}} = \min(n^{\text{bulk}}/n^{\text{sur}}, 1)$ [8]. Возможны и иные варианты выбора α_{des} ; так, в работе [7] принято $\alpha_{\text{des}} = \alpha_{\text{ads}}$. Различие между этими вариантами

обсуждается в [8].

Отметим, что выше описан не физический перенос вещества между глубинными слоями льда и поверхностью пыли, а переопределение того, какое вещество считать принадлежащим толще мантии, а какое — поверхностным слоям. Физический обмен веществом между мантией и поверхностью (диффузия), описанный в [9], в данной модели реализован отдельно. Уменьшение концентрации компонента i в толще мантии из-за диффузии на поверхность задаётся слагаемым $R_i^{\text{diff,b2s}} = N_i^{\text{bulk}} \cdot k_{\text{swap},i} \cdot \min(N^{\text{sur}}/N^{\text{bulk}}, 1)$, где $N^{\text{bulk}} = \sum_i N_i^{\text{bulk}}$ — общее число молекул в толще мантии одной пылинки, $k_{\text{swap},i} = \nu_{0,i} \cdot \exp(-E_{\text{swap},i}/T_{\text{dust}})$ — коэффициент скорости диффузии (здесь $\nu_{0,i}$ — характеристическая вибрационная частота гармонического осциллятора для компонента i , T_{dust} — температура пыли). Чтобы был соблюлён баланс между веществом, уходящим из толщи мантии на поверхность и с поверхности в толщу мантии, уменьшение концентрации соединения i в поверхностных слоях из-за диффузии в глубинные слои ледяной мантии пылинки рассчитывается по формуле $R_i^{\text{diff,s2b}}(i) = N_i^{\text{sur}}/N^{\text{sur}} \cdot \sum_j R_j^{\text{diff,b2s}}$.

Итоговые уравнения химической кинетики, описывающие общее изменение концентрации компонента i на поверхности пыли dn_i^{sur}/dt и в толще мантии dn_i^{bulk}/dt соответственно, выглядят так:

$$\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt} = \left(\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt}\right)^{\text{chem}} - \left(\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt}\right)^{\text{tran}} - R_i^{\text{diff,s2b}}, \quad (1.5)$$

$$\frac{dn_i^{\text{bulk}}}{dt} = \left(\frac{dn_i^{\text{bulk}}}{dt}\right)^{\text{chem}} + \left(\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt}\right)^{\text{tran}} - R_i^{\text{diff,b2s}}. \quad (1.6)$$

Эти уравнения интегрировались на каждой из рассмотренных стадий, причём конечный набор содержаний на каждой стадии использовался в качестве начального набора на следующей стадии.

1.3. Результаты

1.3.1. Сравнение двух- и трёхфазной моделей на стадии облака

Моделирование начинается с фазы молекулярного облака, для которой выбран низкометаллический начальный химический состав [40]. Если произвести расчёт при помощи трёхфазной модели с теми же параметрами, что и в работе [5], то есть с температурой 10 К и длительностью стадии молекулярного облака 10^6 лет, мы получим итоговые соотношения содержаний $i\text{H}_2\text{O} : i\text{CO} : i\text{CO}_2 : i\text{CH}_3\text{OH} = 100 : 29 : 0.2 : 12$. Относительное содержание $i\text{CO}$ и $i\text{CH}_3\text{OH}$ здесь ближе к наблюдательным данным, чем в двухфазном случае, однако содержание $i\text{CO}_2$ по-прежнему крайне низко. В рамках трёхфазных астрохимических моделей, ограничивающихся в твёрдой фазе диффузионными химическими процессами, существуют различные способы поднять содержание CO_2 во льду: изменение параметров начальной фазы моделирования [5], варьирование скоростей реакций, в которые вовлечён $i\text{CO}_2$ [41]. При моделировании эволюции облака в диапазоне температур 10–20 К и на временах до 10^6 лет было обнаружено, что наилучшее согласие с наблюдательными данными в трёхфазном случае достигается для температуры 16 К и длительности фазы молекулярного облака $2 \cdot 10^5$ лет. При таких условиях с использованием той же сетки астрохимических реакций, что и в [5], соотношения содержаний равны $i\text{H}_2\text{O} : i\text{CO} : i\text{CO}_2 : i\text{CH}_3\text{OH} = 100 : 25 : 22 : 1$. Хотя здесь имеется некоторое недопроизводство адсорбированного метанола по сравнению со средними наблюдаемыми значениями (не выходящее, однако, за рамки наблюдаемых обилий [38]), именно эти параметры — температура молекулярного облака 16 К, длительность стадии молекулярного облака $2 \cdot 10^5$ лет — мы взяли для нашей основной модели.

При выбранной температуре $i\text{CO}$ эффективнее конвертируется в $i\text{CO}_2$, чем при 10 К, а уменьшение длительности стадии молекулярного

облака обуславливает более низкое содержание льда метанола. Интересно, что разница температур порядка градуса приводит к существенным различиям в содержаниях адсорбированных соединений. Конкретно, на содержание водяного льда в трёхфазной модели изменение температуры оказывает незначительное действие, тогда как на льды $i\text{CO}$, $i\text{CO}_2$ и $i\text{CH}_3\text{OH}$ влияние температуры более существенно (см. рисунок 1.1). Так, при температуре 15 К через $2 \cdot 10^5$ лет фазы молекулярного облака мы получаем отношения обилий $i\text{H}_2\text{O} : i\text{CO} : i\text{CO}_2 : i\text{CH}_3\text{OH} = 100 : 44 : 7 : 3$, то есть $i\text{CO}$ конвертируется в $i\text{CO}_2$ менее эффективно, чем при 16 К. Основные изменения, обуславливающие различие содержаний $i\text{CO}$ и $i\text{CO}_2$ при 15 К и 16 К, происходят на временах $10^4 - 10^5$ лет. В этом промежутке увеличение содержания диоксида углерода в толще мантии пыли обеспечивается его переносом с поверхности, а в поверхностных слоях самая быстрая реакция образования $g\text{CO}_2$ — это $g\text{OH} + g\text{CO} \rightarrow g\text{CO}_2 + g\text{H}$. (Здесь и далее префиксом “g” обозначены компоненты поверхностных слоёв, а префиксом “b” — соединения из толщи ледяной мантии; “g” + “b” = “i”.) И скорость образования $g\text{CO}_2$ в этой реакции, и скорость его переноса с поверхности в глубинные слои мантии при 16 К выше, чем при 15 К (скорость переноса, в частности, пропорциональна содержанию переносимого вещества). В формулах для вычисления скоростей поверхностных реакций температура пыли стоит в знаменателе показателя экспоненты, и изменение температуры с 15 К до 16 К сопоставимо с изменением числителя экспоненты на $15/16 \approx 0.94$, что и может обуславливать столь значимую разницу в содержаниях — которая, однако, для всех представленных на рисунке 1.1 соединений на момент времени $2 \cdot 10^5$ лет находится в пределах одного порядка. Заметим, что на временах больше $4 \cdot 10^5$ лет разница обилий $b\text{CO}$ в толще ледяной мантии при 15 К и 16 К составляет уже более порядка величины, и именно содержание $b\text{CO}$ на этих временах вносит основной вклад в общее содержание $i\text{CO}$ на пыли.

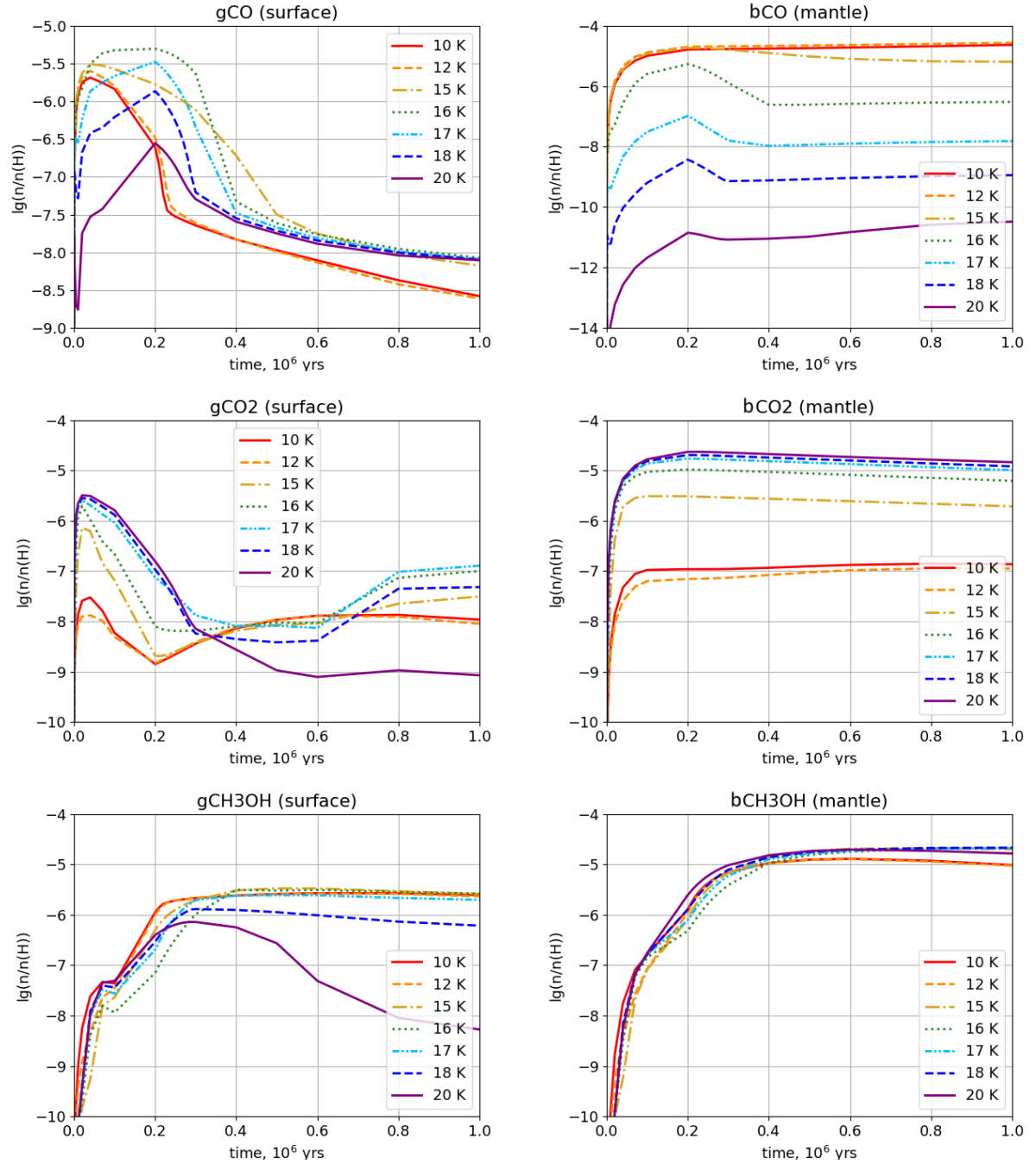


Рис. 1.1. Содержания нескольких основных компонентов льда на стадии молекулярного облака для различных температур в трёхфазной модели.

Для сравнения было проведено моделирование с использованием двухфазной модели, которая применялась в работе [5], при температуре 16 К до времени $2 \cdot 10^5$ лет. Здесь и далее в данной главе рассматриваются только компоненты, содержания которых в какой-либо момент времени и хотя бы в одной из моделей превышают 10^{-12} по отношению к числу ядер водорода. В случае адсорбированных соединений содержания в двухфазной модели сравниваются с суммарным обилием на поверхности пыли и в толще мантии для трёхфазной модели.

Всего в использованной двухфазной модели 652 соединения, в том числе 455 газофазных и 197 адсорбированных. В трёхфазной модели число соединений на пыли удваивается за счёт добавления частиц из толщи мантии. Содержания 355 компонентов (223 газофазных и 132 адсорбированных) на стадии молекулярного облака хотя бы в одной из моделей превышают 10^{-12} . В таблице 3.1 Приложения 1 представлены соединения, у которых в конце стадии молекулярного облака различие обилий в двух- и трёхфазной моделях превышает порядок величины.

Содержания подавляющего большинства газофазных соединений в двух- и трёхфазной моделях согласуются в пределах порядка величины на протяжении всей стадии молекулярного облака. Газофазных компонентов с различием содержаний в двух моделях более чем на порядок всего 10. В их число, в частности, входит метанол, основной источник которого — реактивная десорбция в реакции $gH + gCH_2OH \rightarrow gCH_3OH$. Данная реакция в трёхфазной модели имеет скорость примерно на порядок выше, чем в двухфазной, а реактивная десорбция постоянна для всех поверхностных реакций и составляет 1% от количества образовавшихся продуктов. Разница обилий метанола на пыли в обеих моделях также существенна и составляет более порядка.

Различие вычисленных содержаний адсорбированных соединений между двух- и трёхфазной моделями встречается чаще. У 77 компонентов

(около 60%) это различие превышает порядок величины, причём в некоторых случаях разница может достигать 8–10 порядков. Обилия многих компонентов на пыли в трёхфазной модели оказываются существенно выше, чем в двухфазной: при низких температурах вещество с поверхности пыли эффективно поступает в толщу мантии и сохраняется там, реже вовлекаясь в химические реакции.

1.3.2. Сравнение двух- и трёхфазной моделей на стадии диска

В этом разделе сопоставляется чувствительность к вспышке различных соединений в двух- и трёхфазной моделях. В представленных далее таблицах **жирным шрифтом** выделены соединения, содержания которых в трёхфазной модели до и после вспышки отличаются более чем на порядок, не демонстрируя подобного различия в двухфазной модели. Иными словами, это соединения, которые являются индикаторами вспышки в трёхфазной модели, но не являются ими в двухфазной модели. *Курсивом* выделено единственное соединение (адсорбированный формамид $i\text{NH}_2\text{CHO}$), содержание которого в двухфазной модели до и после вспышки отличается более чем на порядок, но не демонстрирует подобного различия в трёхфазной модели. Иными словами, это соединение является потенциальным индикатором вспышки в двухфазной модели, но не является им в трёхфазной модели. Отметим, что в данной работе индикаторами вспышки в равной степени называются как газофазные, так и адсорбированные соединения, хотя с точки зрения доступных наблюдений “настоящими” индикаторами являются только молекулы в газовой фазе. Наблюдения молекул в ледяных мантиях возможны для очень ограниченного набора соединений [38] и только при специфической геометрии расположения протопланетного диска [42]. Тем не менее, здесь описаны все соединения, реагирующие на вспышку, включая адсорбированные, учитывая, например, что они могут стать видимыми в результате испарения мантий при повторной вспышке.

Во внутренней области диска, имеющей наиболее высокую температуру, наблюдается мало различий между содержаниями в двух- и трёхфазной моделях, и модели можно считать согласующимися почти идеально. Разница обилий в порядки величины имеет место только для нескольких адсорбированных соединений — длинных углеродных цепочек и натрия. В таблице 1.2 представлены компоненты, у которых различие содержаний в двух- и трёхфазной моделях превышает порядок величины. Из-за высокой температуры в этой области вещество с поверхности пыли эффективно возгоняется в газовую фазу, поэтому наличие двух фаз на пыли вместо одной не оказывает существенного влияния на результат моделирования.

Таблица 1.2: Внутренняя область диска. Компоненты, различие содержаний которых в двух- и трёхфазной моделях превышает порядков величины. Выделение шрифтом: см. текст.

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отн-е после/до	
	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC₉	4.0(−24)	2.8(−12)	3.8(−24)	1.4(−13)	1.0	0.1
iC ₆ H ₄	2.8(−9)	2.7(−10)	2.9(−9)	2.9(−10)	1.0	1.1
iC ₇ H ₄	5.1(−10)	1.7(−13)	5.7(−10)	1.9(−13)	1.1	1.1
iC ₈ H	2.1(−17)	1.0(−11)	2.0(−17)	6.1(−12)	1.0	0.6
iC ₈ H ₄	1.6(−10)	4.5(−16)	2.5(−10)	3.9(−15)	1.5	8.7
iC ₉ H	8.8(−18)	9.3(−12)	7.4(−18)	3.8(−12)	0.9	0.4

продолжение следует

<i>продолжение</i>						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₉ H ₄	6.9(−11)	2.1(−17)	9.7(−11)	1.6(−15)	1.4	77
iNa	8.7(−17)	1.4(−10)	7.7(−17)	1.4(−10)	0.9	1.0

Для более отдалённых областей протопланетного диска характерна следующая картина: как в спокойной фазе, так и после вспышки содержания многих адсорбированных соединений в трёхфазной модели на порядки величины выше, чем в двухфазной. Вещество на пыли эффективно сохраняется в толще мантии, где оно медленнее вступает в реакции по сравнению с веществом поверхностных слоёв. Исключение составляют углеродные цепочки вида gC_xH₄, которых в двухфазном случае больше, чем в трёхфазном. Для них разница в содержаниях возникает уже во время спокойной стадии протопланетного диска и сохраняется на протяжении дальнейшей эволюции. Как в двухфазной, так и в трёхфазной модели молекулы вида gC_xH₄ на пыли эффективно разрушаются фотонами космических лучей, но в двухфазном случае их количество восполняется в реакциях гидрирования, а в трёхфазном, поскольку основная часть адсорбированного вещества сосредоточена в толще ледяной мантии, реакции гидрирования идут менее эффективно, и содержание рассматриваемых молекул падает. Отметим, что с удалением от звезды различие обилий в двух- и трёхфазном случаях более чем на порядок величины наблюдается только для самых длинных углеродных цепочек — gC₈H₄ и gC₉H₄ во внешнем диске и gC₉H₄ в экстремально внешнем диске.

Таблица 1.3: Газофазные и избранные адсорбированные компоненты, различие содержаний которых в двух- и трёхфазной моделях превышает порядок величины. Выделение шрифтом: см. текст.

Промежуточная область

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отн-е после/до	
	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
H	9.3(−5)	6.2(−6)	9.2(−5)	7.5(−6)	1.0	1.2
CN	1.9(−13)	3.0(−12)	1.4(−12)	4.4(−12)	7.2	1.4
NO	3.8(−13)	1.2(−10)	4.2(−13)	1.2(−11)	1.1	0.1
CS	4.9(−14)	2.4(−12)	5.4(−14)	1.1(−14)	1.1	5.0(−3)
CH₃	1.6(−11)	1.5(−12)	1.2(−11)	2.9(−11)	0.8	18.9
HNO	3.9(−13)	5.1(−9)	4.8(−13)	4.8(−13)	1.2	9.4(−5)
O₂	1.7(−12)	5.7(−14)	1.9(−12)	3.0(−10)	1.1	5256
NS	2.4(−16)	1.5(−12)	3.3(−16)	4.3(−16)	1.4	2.9(−4)
N₂H⁺	2.7(−14)	1.1(−12)	2.7(−14)	1.1(−12)	1.0	0.9
H₂NO⁺	3.8(−16)	2.7(−12)	4.3(−16)	3.6(−16)	1.2	1.3(−4)
iC₄H₄	7.6(−8)	9.4(−12)	1.0(−7)	2.2(−8)	1.4	2366

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₅ H ₄	1.4(−8)	7.4(−12)	2.8(−8)	6.1(−11)	1.9	8.3
iC ₆ H ₄	3.6(−9)	2.0(−12)	3.1(−8)	5.7(−10)	8.6	282
iC ₇ H ₄	9.1(−10)	4.8(−13)	2.6(−9)	6.7(−12)	2.9	14.0
iC ₈ H ₄	2.9(−10)	1.6(−13)	1.4(−9)	5.5(−12)	4.8	34.2
iC ₉ H ₄	1.2(−10)	6.2(−14)	1.2(−9)	4.2(−12)	10.0	67
iCH ₃ OH	2.9(−8)	7.9(−11)	2.9(−8)	5.9(−10)	1.0	7.6
iNH ₂ OH	1.3(−14)	2.0(−6)	1.3(−14)	2.0(−6)	1.0	1.0

Внешняя область

[illegible]

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
NH	2.9(−12)	1.1(−13)	2.9(−12)	3.6(−12)	1.0	32.8
H₂O₂	5.9(−19)	5.5(−15)	5.9(−19)	1.3(−12)	1.0	240
N₂	3.2(−7)	2.4(−9)	3.2(−7)	1.3(−6)	1.0	542
O₂H	6.2(−19)	5.4(−15)	7.1(−19)	1.4(−12)	1.2	252
N₂H⁺	1.3(−11)	6.9(−13)	1.4(−11)	1.5(−11)	1.0	22.5
iCO	1.3(−5)	8.9(−7)	1.3(−5)	1.9(−6)	1.0	2.1
iC₆H₆	2.1(−12)	1.5(−12)	2.1(−12)	2.4(−9)	1.0	1591
iC₈H₄	2.8(−10)	2.8(−11)	2.8(−10)	2.8(−11)	1.0	1.0
iC₉H₄	1.2(−10)	1.1(−11)	1.2(−10)	1.1(−11)	1.0	1.0
iCH₃OH	2.0(−7)	4.0(−6)	2.0(−7)	4.0(−6)	1.0	1.0
iNH₂OH	4.3(−28)	1.8(−26)	1.1(−15)	9.9(−8)	2.5(12)	5.5(18)

Экстремально внешняя область

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отношение после/до	
	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
CO	2.6(−9)	4.0(−10)	9.3(−7)	8.9(−8)	358	225
S	9.5(−12)	2.6(−11)	1.3(−11)	2.1(−10)	1.4	8.3
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
CN	1.3(−12)	6.7(−14)	1.6(−9)	8.7(−10)	1235	1.3(4)
NO	4.0(−10)	2.2(−10)	4.7(−9)	6.0(−8)	11.7	274
SO	3.9(−15)	3.9(−15)	2.3(−13)	1.2(−11)	58.4	3199
CS	1.4(−13)	3.5(−14)	1.9(−12)	8.6(−11)	14.1	2441
C ₃ H ₄	3.0(−12)	2.7(−13)	3.8(−12)	3.6(−12)	1.3	13.3
C ₄ H ₂	7.2(−14)	1.5(−14)	2.4(−13)	6.8(−12)	3.3	460
CH ₂ CO	6.5(−18)	8.4(−18)	7.1(−13)	8.1(−12)	1.1(5)	9.6(5)
CH ₃ OH	7.7(−13)	2.0(−11)	4.8(−13)	1.1(−12)	0.6	0.1
HCOOH	2.4(−17)	6.9(−18)	1.2(−13)	1.3(−10)	5202	1.8(7)
HCS	5.5(−14)	2.8(−15)	7.8(−14)	1.3(−12)	1.4	467
HNO ⁺	4.8(−13)	3.2(−13)	4.9(−13)	1.8(−11)	1.0	57.2
O ₂	1.7(−15)	1.9(−13)	6.7(−13)	4.6(−9)	392	2.5(4)
OCS	9.2(−13)	3.2(−13)	2.2(−12)	5.2(−11)	2.4	161
C ₂ N	5.6(−15)	8.4(−16)	4.5(−13)	5.8(−12)	79.6	6968
C ₂ O	1.1(−17)	1.8(−17)	6.7(−14)	1.9(−12)	5841	1.1(5)
C ₂ S	5.7(−18)	1.8(−17)	3.6(−15)	2.2(−12)	633	1.2(5)
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
C ₃ H ₃ N	3.3(−15)	5.4(−14)	2.5(−12)	2.8(−11)	768	512
C ₄	3.8(−15)	9.0(−16)	5.1(−14)	1.2(−12)	13.4	1365
C ₄ H	1.8(−14)	4.6(−15)	1.3(−13)	4.0(−12)	7.4	864
C ₄ H ₃	2.3(−13)	1.9(−14)	2.5(−13)	8.2(−12)	1.1	433
C ₅ H ₂	3.5(−15)	1.2(−15)	3.8(−14)	2.8(−12)	10.9	2246
HCN	2.8(−12)	1.2(−13)	4.4(−9)	1.6(−9)	1617	1.3(4)
CH ₂ OH	7.8(−13)	1.9(−11)	6.2(−13)	3.1(−13)	0.8	2(−2)
H ₂ CO	6.9(−12)	4.9(−11)	8.6(−12)	9.5(−11)	1.3	1.9
CO ₂	4.5(−11)	4.2(−14)	6.9(−11)	4.1(−10)	1.51	9534
H ₂ CS	9.5(−14)	7.7(−15)	1.9(−13)	1.2(−11)	2.0	1602
H ₂ O ₂	2.2(−16)	9.5(−14)	1.5(−16)	7.6(−12)	0.7	80
HC ₂ O	1.2(−19)	3.2(−18)	1.8(−15)	1.1(−11)	1.6(4)	3.6(6)
HC ₃ O	7.0(−18)	1.2(−16)	1.6(−14)	2.2(−12)	2363	1.8(4)
HCCN	3.4(−14)	8.5(−15)	2.8(−13)	6.1(−12)	8.4	719
HNCO	1.6(−13)	6.5(−15)	9.3(−13)	6.7(−11)	5.8	1.0(4)
N ₂ O	1.8(−13)	4.0(−14)	2.2(−13)	1.4(−11)	1.3	353
продолжение следует						

<i>продолжение</i>						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
NS	8.2(−13)	1.4(−13)	1.9(−12)	6.2(−11)	2.3	443
O₂H	1.9(−16)	7.9(−14)	1.8(−16)	1.6(−11)	0.95	201
O₃	2.6(−16)	3.3(−14)	2.3(−14)	5.4(−8)	88.4	1.6(6)
OCN	1.9(−13)	4.7(−14)	6.1(−12)	7.2(−10)	32.5	1.5(4)
SO₂	1.1(−18)	4.4(−16)	1.0(−15)	8.6(−12)	917	2.0(4)
iCO	2.2(−5)	6.6(−6)	2.1(−5)	2.0(−6)	1.0	0.3
iC ₉ H ₄	1.1(−10)	1.1(−11)	1.1(−10)	1.1(−11)	1.0	1.0
iCH ₃ OH	1.4(−7)	8.1(−6)	1.4(−7)	8.2(−6)	1.0	1.0

В таблице 1.3 приводится список всех газофазных и избранных адсорбированных компонентов (длинные углеродные цепочки gC_xH_4 и соединения, подробно рассмотренные в [5]), содержания которых в двух- и трёхфазной моделях отличаются более, чем на порядок, для промежуточной, внешней и экстремально внешней областей диска соответственно. Полный список адсорбированных компонентов, обладающих указанными свойствами, можно найти в таблицах 3.2–3.4 Приложения 1.

В промежуточной и внешней областях протопланетного диска трёхфазная модель предлагает некоторое количество новых потенциальных индикаторов вспышечной активности по сравнению с двухфазной моделью, в том числе около десятка газофазных компонентов в каждой из областей. В экстремально внешней области число новых газофазных индикаторов достигает 30. В частности, индикатором вспышки всюду, кроме внутренней области диска, может служить газофазный молекулярный кислород.

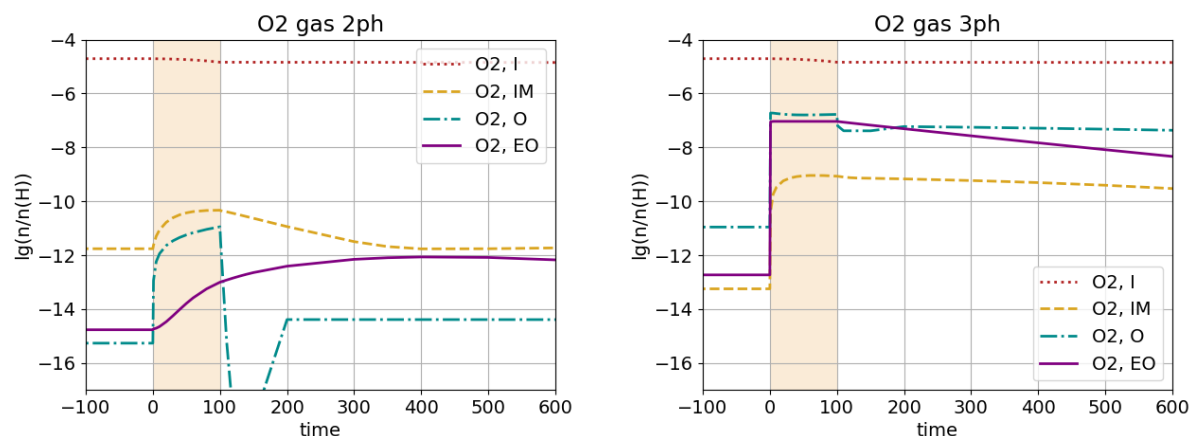


Рис. 1.2. Молекулярный кислород как возможный индикатор вспышечной активности. Здесь и далее в Главе 1 на рисунках за нулевой момент времени принимается начало вспышки светимости.

В [5] молекулярный кислород входил в число предполагаемых индикаторов вспышечной активности только в экстремально внешней области тёмного диска, где его содержание после вспышки превышало довспышечное на три порядка. В нашей работе всюду, кроме внутренней области протопланетного диска, в трёхфазном случае O_2 демонстрирует различие до- и пост-вспышечных содержаний на 3–4 порядка. Его содержание быстро растёт в начале вспышки благодаря десорбции с поверхности пыли и реактивной десорбции в реакции $gH + gO_3 \rightarrow gO_2 + gOH$. После вспышки содержание O_2 в газовой фазе медленно снижается в основном за счёт диссоциации и ионизации молекул кислорода фотонами космических лучей, а также адсорбции на пыль (рисунок 1.2). В нашей двухфазной модели различия обилий O_2 до и спустя 500 лет после вспышки находятся в пределах порядка, а во внешней и экстремально внешней областях эти содержания и вовсе оказываются ниже установленного порога 10^{-12} . Во внутренней области O_2 в обеих моделях сосредоточен в основном в газовой фазе и на вспышку почти не реагирует, сохраняя газофазные содержания порядка 10^{-5} .

Из хорошо наблюдаемых [43] молекул индикаторами вспышечной активности могут оказаться, к примеру, CS , CN , HCN в экстремально внеш-

ней области протопланетного диска. Их содержания спустя 500 лет после вспышки заметно выше довыспышечных, и данный эффект более ярко проявляется в трёхфазной модели. Также в трёхфазной модели индикаторами оказываются CS в промежуточной области диска (после вспышки его содержание в этой области падает на несколько порядков и через 500 лет после вспышки всё ещё остаётся ниже порога 10^{-12}) и N_2H^+ во внешней области диска (здесь его содержание спустя 500 лет после вспышки более чем на порядок величины выше по сравнению с довыспышечным).

В работе [44] упоминались наблюдения изотопологов HCO^+ как неявных трейсеров снеговой линии воды в протопланетных дисках — присутствие большого количества молекул воды в газовой фазе уменьшает содержание изотопологов HCO^+ . Действительно, при использовании трёхфазной модели во внутренней области протопланетного диска на спокойной стадии содержание HCO^+ достигает порядка 10^{-12} , с началом вспышки резко падает до 10^{-15} , в процессе вспышки практически не меняется, а после вспышки быстро возвращается к довыспышечным значениям. Соответствующее понижение содержания изотопологов HCO^+ может быть выявлено в наблюдениях. Отметим, что в настоящей модели изотопологи не рассматриваются, и в наборе химических соединений присутствует только обобщённая молекула HCO^+ .

Далее рассмотрим некоторые компоненты, отмеченные как интересные в работе [5].

Адсорбированный бензол iC_6H_6 . В [5] было упомянуто, что бензольный лёд, в отличие от многих других адсорбированных соединений, аккумулируется на пыли во время и после вспышки. Здесь мы наблюдаем аналогичные процессы как в двухфазной, так и в трёхфазной моделях (рисунок 1.3). Во время и после вспышки бензол производится в газовой фазе. Во время вспышки основными его источниками являются реакции $\text{C}_6\text{H}_7^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + \text{NH}_4^+$ и $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_4\text{H}_3 \rightarrow \text{H} + \text{C}_6\text{H}_6$, а после вспыш-

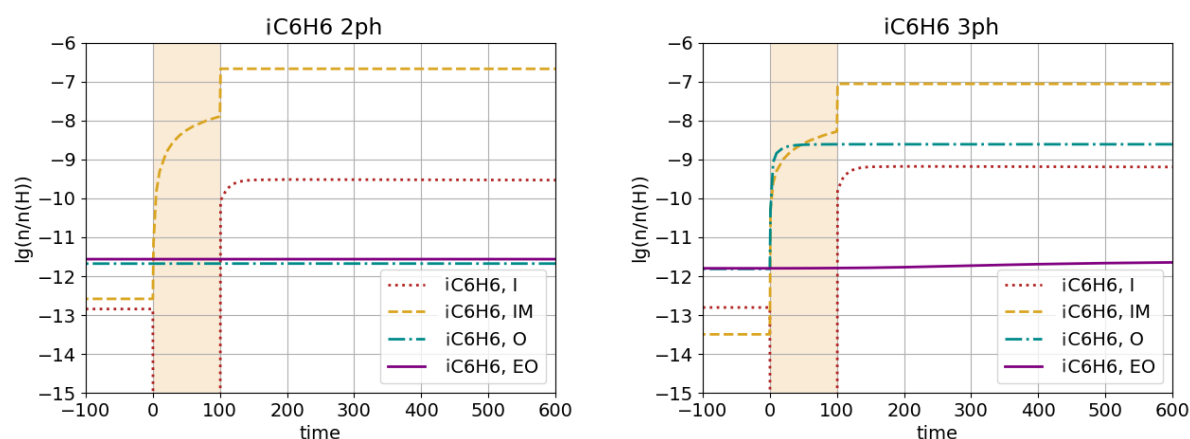


Рис. 1.3. Содержания адсорбированного бензола в двухфазной и трёхфазной моделях в различных областях протопланетного диска.

ки — диссоциативная рекомбинация иона $C_6H_7^+$. В трёхфазной модели в промежуточной и внешней областях бензол начинает аккумулироваться на пыли во время вспышки, а во внутренней области — уже после вспышки. В результате содержание адсорбированного бензола после вспышки во внутренней, промежуточной и внешней областях на порядки величины превышает довспышечное. В экстремально внешней области содержание бензола в толще ледяной мантии не претерпевает существенных изменений из-за вспышки и сохраняется на уровне порядка 10^{-12} . Некоторые изменения в поверхностных слоях и в газовой фазе имеют место, однако содержания там на порядки ниже, чем в толще мантии. В двухфазной модели существенные изменения содержания адсорбированного бензола в результате вспышки характерны для внутренней и промежуточной областей протопланетного диска и не затрагивают внешнюю и экстремально внешнюю области.

Метанол CH_3OH . В двухфазном случае в экстремально внешней области протопланетного диска содержание газофазного метанола находится ниже заданного предела (10^{-12}) на всём времени моделирования стадии протопланетного диска (рисунок 1.4). В трёхфазном случае довспышечное содержание метанола в этой области превышает 10^{-11} . В начале

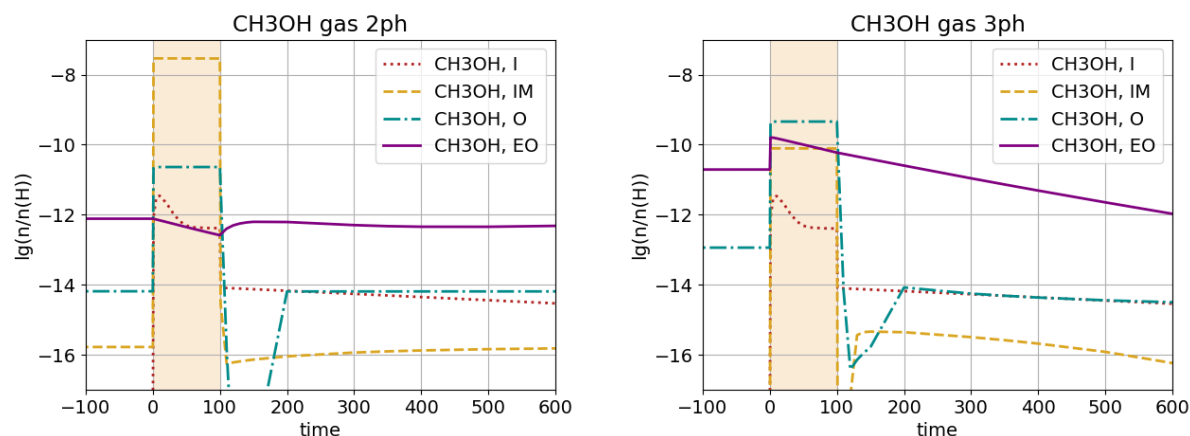


Рис. 1.4. Содержания метанола в двухфазной и трёхфазной моделях для различных областей протопланетного диска.

вспышки оно повышается приблизительно на порядок, а затем медленно падает в процессе и после вспышки. Возрастание содержания в начале вспышки в основном обусловлено реактивной десорбцией в реакции $\text{gH} + \text{gCH}_2\text{OH} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH}$. После вспышки скорость данной реакции падает на несколько порядков, что наряду с разрушением CH_3OH фотонами космических лучей и при отсутствии других значимых источников метанола способствует возвращению его содержания к прежним значениям и даже падению ниже них. В отличие от работы [5], где содержание метанола в экстремально внешней области через 200 лет после вспышки в 50 раз превышает довспышечное, в трёхфазном случае через 200 лет после вспышки содержание метанола уже несколько ниже довспышечного, а через 500 лет после вспышки оно падает более чем на порядок величины по сравнению с довспышечным. Это означает, что метанол, тем не менее, может служить индикатором вспышечной активности в экстремально внешней области диска. Стоит отметить, что в данной области вспышка практически не затрагивает глубинные слои ледяной мантии, в которых содержание льда метанола держится на уровне 10^{-6} на протяжении всего времени моделирования стадии протопланетного диска. В более близких к звезде областях протопланетного диска изменение содержания адсорбированного метанола

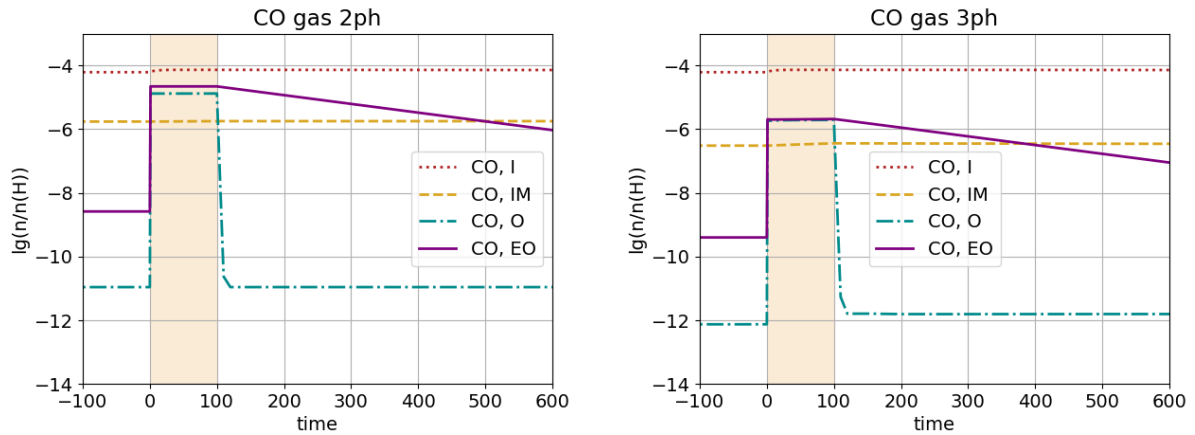


Рис. 1.5. Содержания CO в двухфазной и трёхфазной моделях в различных областях протопланетного диска.

во время и после вспышки в основном определяется процессами адсорбции и десорбции.

Оксиды углерода CO, CO₂. В [5] отмечалось, что CO и CO₂ являются индикаторами произошедшей вспышки только в экстремально внешней области протопланетного диска. В настоящей работе во внутренней и промежуточной областях диска как в двухфазном, так и в трёхфазном случаях почти весь CO находится в газе, поэтому вспышка не оказывает ощутимого влияния на его содержание (рисунок 1.5). Для внешней области в обоих случаях изменение содержания CO во время и после вспышки обусловлено его десорбцией и последующей адсорбцией, которая происходит достаточно быстро. В экстремально внешней области в обоих случаях из-за низкой плотности адсорбция происходит медленно, вследствие чего монооксид углерода сохраняет высокие газофазные содержания на протяжении столетий после вспышки.

Во внутренней области протопланетного диска как в двухфазной, так и в трёхфазной модели содержание CO₂ в газовой фазе падает во время вспышки (в основном из-за возрастания скорости реакции $\text{H}_2 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$, которая не была сколь-нибудь значимой до вспышки) и затем медленно возвращается к прежним значениям, оставаясь

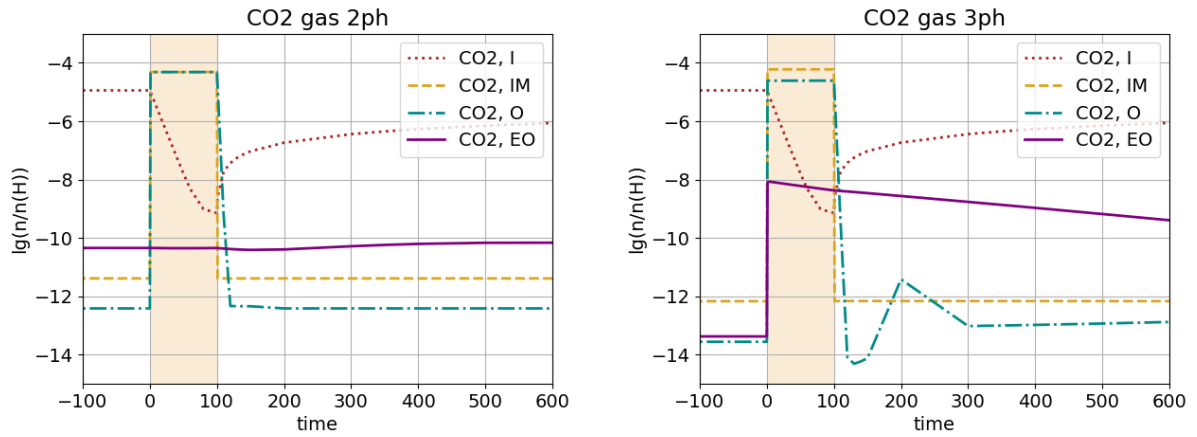


Рис. 1.6. Содержания CO_2 в двухфазной и трёхфазной моделях в различных областях протопланетного диска.

при этом через 500 лет после вспышки более чем на порядок ниже довспышечной (рисунок 1.6). В промежуточной и внешней областях протопланетного диска для обеих моделей изменение содержания CO_2 из-за вспышки в основном обусловлено его десорбцией с поверхности пыли и последующей адсорбцией. Для экстремально внешней области в двухфазной модели обилия газофазного и адсорбированного диоксида углерода в процессе вспышки практически не меняются, сохраняя значения порядка 10^{-11} и 10^{-5} , соответственно. В трёхфазной модели содержание CO_2 в этой области возрастает в начале вспышки примерно на пять порядков (в основном за счёт реактивной десорбции в реакции $\text{gOH} + \text{gCO} \rightarrow \text{gCO}_2 + \text{gH}$) и затем медленно снижается после вспышки: CO_2 разрушается фотонами космических лучей и медленно оседает на пыль, однако реакция $\text{gOH} + \text{gCO} \rightarrow \text{gCO}_2 + \text{gH}$ продолжает быть его источником в газовой фазе и отчасти восполняет его запас. Таким образом, в трёхфазной модели подтверждается, что CO_2 во внешней области протопланетных дисков способен быть индикатором вспышек светимости. Отметим, что в этой области подавляющая часть CO_2 хранится в толще ледяной мантии пыли, где его содержание во время вспышки почти не претерпевает изменений, оставаясь на уровне порядка 10^{-5} .

Адсорбированный гидроксилламин $i\text{NH}_2\text{OH}$. В работе [5] у адсорбированного гидроксилламина во внешнем диске оказалось наибольшее соотношение довспышечного и поствспышечного содержаний, которое составило порядка 10^{15} . В нашем исследовании во внутренней и промежуточной областях диска как в двухфазном, так и в трёхфазном случаях изменение содержания гидроксилламина на поверхности пыли и в газовой фазе обусловлено в основном десорбцией из-за повышения температуры во время вспышки и последующей адсорбцией (рисунок 1.7). Во внешней и экстремально внешней областях в трёхфазном случае адсорбированный гидроксилламин оказывается индикатором вспышечной активности: в этих областях его содержания в процессе вспышки возрастают на 18 порядков по сравнению с довспышечными и достигают 10^{-7} во внешней области и 10^{-8} в экстремально внешней. Как и в [5], основным механизмом производства гидроксилламина на поверхности пыли оказывается реакция $g\text{OH} + g\text{NH}_2 \rightarrow g\text{NH}_2\text{OH}$, которая не была столь эффективной до вспышки из-за наличия достаточного количества атомарного водорода на пыли, использовавшегося в реакции синтеза аммиака $g\text{H} + g\text{NH}_2 \rightarrow g\text{NH}_3$. Из-за вспышки водород как летучее соединение быстро испаряется с пыли, и на пыли начинают доминировать реакции с более тяжёлыми компонентами, в том числе вышеуказанная реакция образования гидроксилламина. Стоит отметить, что в упомянутых здесь случаях, как и в работе [5], довспышечное содержание гидроксилламина на пыли близко к численной неопределённости, поэтому конкретное отношение до- и послевспышечных содержаний физического значения не имеет. Но само обнаружение гидроксилламина на поверхности пыли может свидетельствовать о произошедшей несколько сотен лет назад вспышке светимости. В двухфазном случае во внешней и экстремально внешней областях содержание льда NH_2OH также возрастает во время вспышки на порядки величины, однако остаётся ниже порога 10^{-12} .

По сравнению с двухфазной моделью исчезает только один потен-

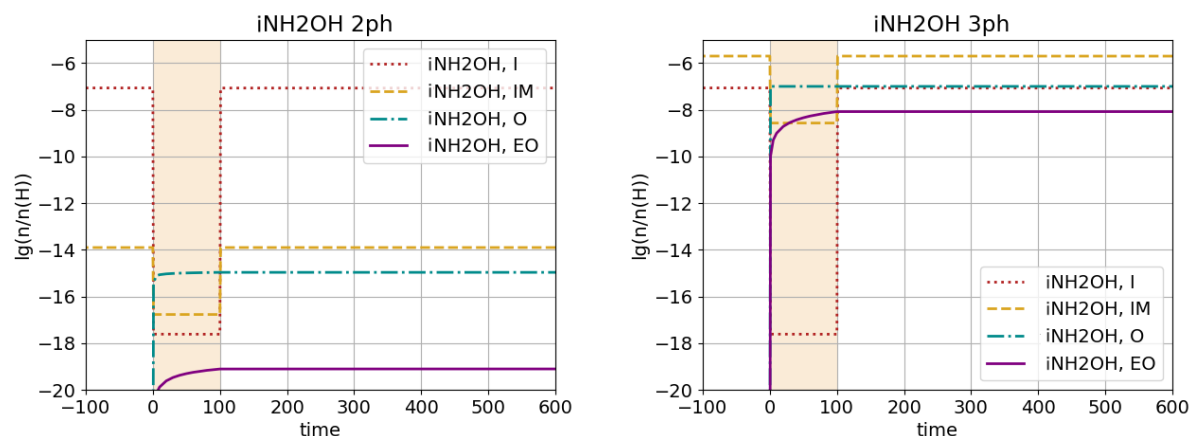


Рис. 1.7. Содержание адсорбированного гидроксиламина в двухфазной и трёхфазной моделях в различных областях протопланетного диска.

циальный индикатор вспышечной активности — формамид $i\text{NH}_2\text{CHO}$ на поверхности пыли в промежуточной области диска — и приобретает значительное количество новых индикаторов. В промежуточной и внешней областях это в основном адсорбированные компоненты, в экстремально внешней области количественный перевес у новых газофазных индикаторов. Что касается адсорбированного формамида, его довспышечное содержание в двухфазной модели оказывается на два порядка ниже, чем в трёхфазной. Основной путь производства формамида в обеих моделях — реакция $g\text{NH}_2 + g\text{HCO} \rightarrow g\text{NH}_2\text{CHO}$, и в двухфазной модели до вспышки она идёт заметно медленнее, чем в трёхфазной, из-за меньшего содержания обоих реагентов.

1.4. Обсуждение результатов

При удалении от звезды температура понижается и вещества на пыли оказывается больше, поэтому становится существеннее наличие глубинных слоёв мантии как отдельной фазы. Во внутренней области протопланетного диска двух- и трёхфазная модели дают практически идентичные результаты, а при продвижении к краю диска разница в результатах этих моделей становится более значимой.

В трёхфазном случае потенциальные индикаторы вспышечной активности имеют тенденцию проявляться в большем числе модельных областей, чем в двухфазном. Так, молекулярный кислород в двухфазной модели не является индикатором ни в одной из областей, а в трёхфазной он оказывается индикатором во всех областях протопланетного диска, кроме внутренней. Адсорбированный бензол в двухфазной модели является индикатором вспышечной активности во внутренней и промежуточной областях диска, а в трёхфазной — во всех областях, за исключением экстремально внешней.

Одна из целей моделирования состояла в том, чтобы получить химический состав молекулярного облака, приближенный к наблюдаемому. Важно отметить, что уже само повышение температуры до 16 К без введения глубинных слоёв ледяной мантии как отдельной фазы обуславливает приемлемые содержания $i\text{CO}$ и $i\text{CO}_2$, однако получить содержание адсорбированного метанола, близкое к наблюдаемому хотя бы по порядку величины, таким образом не удаётся. В двухфазной модели при 16 К через $2 \cdot 10^5$ лет после начала стадии молекулярного облака отношения обилий составляют $i\text{H}_2\text{O} : i\text{CO} : i\text{CO}_2 : i\text{CH}_3\text{OH} = 100 : 30 : 43 : 0.04$.

Возможным источником неопределённости в полученных результатах являются энергии активации поверхностных процессов. В частности, в работе [45] сообщается, что поверхностная реакция $i\text{C} + i\text{H}_2 = i\text{CH}_2$ не имеет барьера активации и поэтому оказывается эффективной при низких температурах, тогда как в нашей модели для этой реакции принят барьер, равный 2500 К. Чтобы проверить влияние наличия барьера на содержания основных компонентов ледяной мантии, были проведены расчёты при помощи трёхфазной модели для условий молекулярного облака при температуре 10 К на протяжении 10^6 лет (как в [5]) и при 16 К на протяжении $2 \cdot 10^5$ лет. Выключение барьера для упомянутой реакции оказало лишь незначительное влияние на содержания воды, моно- и диоксидов углерода, а также метанола в мантии пыли. В первом случае было получено

соотношение $i\text{H}_2\text{O} : i\text{CO} : i\text{CO}_2 : i\text{CH}_3\text{OH} = 100 : 30 : 0.1 : 14$, во втором — $i\text{H}_2\text{O} : i\text{CO} : i\text{CO}_2 : i\text{CH}_3\text{OH} = 100 : 26 : 21 : 2$. Напомним, что в стандартном варианте, использованном в расчётах, при температуре 10 К и длительности стадии молекулярного облака 10^6 лет это соотношение оказалось равно $100 : 29 : 0.2 : 12$, а при температуре 16 К и длительности стадии молекулярного облака $2 \cdot 10^5$ лет $i\text{H}_2\text{O} : i\text{CO} : i\text{CO}_2 : i\text{CH}_3\text{OH} = 100 : 25 : 22 : 1$. Причина незначительного влияния барьера активации этой реакции, по видимому, заключена в невысоком содержании реагентов. На стадии молекулярного облака при температуре 16 К максимальное содержание атомарного углерода на пыли в трёхфазной модели составляет порядка 10^{-13} , а молекулярного водорода — порядка 10^{-19} . Углерод поступает на пыль в основном в составе CO, и единственный путь к его возвращению в атомарное состояние — реакция диссоциации CO фотонами космических лучей на поверхности пыли, которая недостаточно эффективна, чтобы обеспечить высокое содержание атомарного углерода.

Следует отметить, что и наши модели, и модели, используемые в [5] и [6], рассматривают исключительно диффузионную химию на поверхности космической пыли — то есть химические реакции, происходящие по механизму Ленгмюра-Хиншельвуда. Вероятно, значимая диффузия в толще ледяной мантии имеет место только для лёгких компонентов (H, H₂), и изменение содержаний химических соединений в мантии космической пыли во многом обусловлено недиффузионными механизмами. Некоторые из важных недиффузионных механизмов описаны и промоделированы в [29]. В Главе 2 диссертационной работы продемонстрирована значимость недиффузионных механизмов для образования сложных органических соединений в холодных плотных областях межзвёздной среды на примере моделирования химического состава дозвёздного ядра L1544.

1.4.1. Поведение и области проявления значимых индикаторов вспышки в различных моделях

В работе [5] сообщалось о высоких содержаниях некоторых длинных углеродных цепочек на поверхности пыли. В нашей трёхфазной модели длинные углеродные цепочки формируются в среднем эффективнее, чем в двухфазной (исключение составляют цепочки вида gC_xH_4 , о которых говорилось в предыдущем разделе). Почти все углеродные цепочки с числом атомов углерода ≥ 3 в трёхфазной модели в конце стадии молекулярного облака имеют содержания, превышающие 10^{-12} , а в двухфазной модели это верно только для цепочек вида gC_xH_2 и gC_xH_4 .

Некоторые значимые потенциальные индикаторы прошлых вспышек светимости демонстрируют различное поведение в моделях из настоящей работы и в модели [5] (напомним, что там молекулярное облако моделируется при 10 К на протяжении 10^6 лет). Например, в [5] метанол является индикатором вспышечной активности в экстремально внешней области, поскольку его содержание падает после вспышки достаточно медленно. Что касается настоящей работы, в двухфазном случае метанол на вспышку почти не реагирует, а в трёхфазном его обилие после вспышки, напротив, снижается довольно быстро. Таким образом, в данной работе индикатором вспышки оказывается меньшее содержание метанола по сравнению с его содержанием в спокойном протопланетном диске, а в работе [5] — большее.

Во внутренней области содержание CO_2 и в двухфазной, и в трёхфазной модели демонстрирует поведение, аналогичное тому, которое упоминалось в [5] (только падает в конце стадии вспышки не до 10^{-10} , а до 10^{-9}). После окончания вспышки его содержание повышается, но через 500 лет после вспышки оно всё ещё более чем на порядок ниже довыспышечного. И работа [5], и настоящая работа показывают, что в близких к звезде областях протопланетного диска говорить о вспышечной активности будет скорее недостаток CO_2 по сравнению со значениями для спокойного диска,

а в удалённых от звезды областях — его избыток. CO_2 оказывается индикатором произошедшей вспышки в экстремально внешней области в [5] и в нашей трёхфазной модели, однако в двухфазной модели индикатором в этой области он не является.

Такой значимый индикатор, как CO, и в настоящей работе, и в [5] демонстрирует одинаковые свойства: во внутренней и промежуточной областях на вспышку практически не реагирует и служит индикатором вспышечной активности лишь в экстремально внешней области протопланетного диска. Стоит отметить, что в каждой из модельных областей наши двухфазные и трёхфазные содержания CO ведут себя схожим образом, хотя могут различаться примерно на порядок.

Как и в [5], в нашей трёхфазной модели большинство потенциальных индикаторов вспышки оказываются сосредоточенными в экстремально внешней области протопланетного диска. В некоторых областях трёхфазная модель предлагает дополнительные индикаторы по сравнению с [5] — например, в трёхфазной модели адсорбированный бензол оказывается индикатором не только в промежуточной и внутренней областях, как в [5], но и во внешней (а в двухфазной модели — только в промежуточной и внутренней, как и в [5]). Адсорбированный гидроксилламин в трёхфазной модели оказывается индикатором не только во внешней области, как у [5], но и в экстремально внешней. Молекулярный кислород в трёхфазной модели может служить индикатором всюду, кроме внутренней области (а в нашей двухфазной и в модели [5] — только в экстремально внешней). В нашей двухфазной модели по сравнению с трёхфазной и с [5] некоторые индикаторы исчезают — например, метанол, адсорбированный гидроксилламин и диоксид углерода в экстремально внешней области диска.

Формальдегид H_2CO , упоминавшийся в [5] как индикатор вспышечной активности в экстремально внешней области, не оказывается индикатором ни в двухфазной, ни в трёхфазной моделях — его содержания в

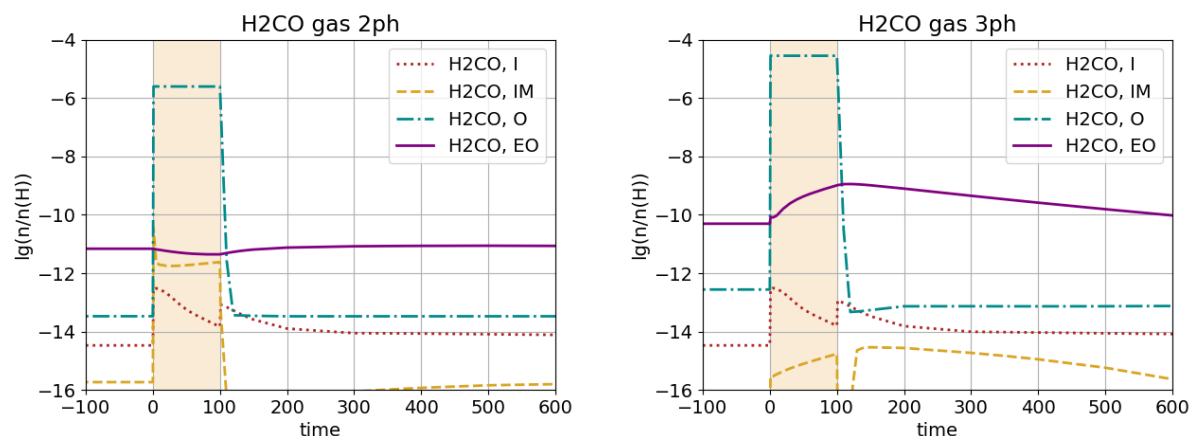


Рис. 1.8. Содержания H_2CO в двухфазной и трёхфазной моделях для различных областей протопланетного диска.

этой области до вспышки и спустя 500 лет после неё различаются не более чем на порядок. Интересно, что как потенциальный индикатор отмечают формальдегид и [6], однако там речь идёт о недавно закончившихся вспышках (30–120 лет назад). В нашей трёхфазной модели H_2CO в экстремально внешней области протопланетного диска на упомянутых временах действительно демонстрирует превышение содержания относительно до-вспышечного более чем на порядок величины, однако затем его содержание постепенно падает и он прекращает быть индикатором. В двухфазной модели H_2CO в экстремально внешней области на вспышку практически не реагирует (рисунок 1.8).

Также в [6] отмечается, что гидроксилламин NH_2OH в газовой фазе сохраняет превышение содержания над до-вспышечным уровнем более чем на три порядка в течение тысячелетий после вспышки. В нашей двухфазной модели NH_2OH во внутренней области во время вспышки достигает содержаний порядка 10^{-7} и затем по окончании вспышки очень быстро оседает на пыль, отчего его обилие в газовой фазе сравнивается с до-вспышечным, которое было ниже выбранного нами предела 10^{-12} . В других модельных точках протопланетного диска содержание гидроксилламина в газовой фазе не превышает 10^{-12} до, во время и после вспышки. В трёхфазной модели

поведение NH_2OH во внутренней области аналогично. В промежуточной области протопланетного диска во время вспышки он достигает содержания порядка 10^{-6} и после вспышки быстро оседает на пыль. Таким образом, ни в одной из моделей настоящей работы NH_2OH в газовой фазе индикатором ранее произошедших вспышек не оказался. В работе [5] газофазный гидроксилламин также не упоминается в числе индикаторов в тёмном диске, однако там он является индикатором в атмосфере во внешней области диска. В настоящей работе атмосфера не рассматривалась.

1.4.2. Влияние отношения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ на число индикаторов вспышки

Более существенную роль может играть отношение барьера диффузии к барьеру десорбции $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$. В нашей модели для любого поверхностного соединения оно принято равным 0.5, однако существуют исследования, указывающие, что оно может быть ниже. Например, в работе [46] были получены отношения 0.31 для gCO и 0.39 для gCO_2 . Если в нашей трёхфазной модели принять $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ равным 0.3, то уже при температуре 10 К получается заметно лучшее согласие с наблюдательными данными для стадии молекулярного облака: после 10^6 лет модельного времени соотношения обилий составляют $\text{iH}_2\text{O} : \text{iCO} : \text{iCO}_2 : \text{iCH}_3\text{OH} = 100 : 27 : 3 : 14$, а после $2 \cdot 10^5$ лет $\text{iH}_2\text{O} : \text{iCO} : \text{iCO}_2 : \text{iCH}_3\text{OH} = 100 : 35 : 11 : 5$.

Если принять $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.3$ в трёхфазной модели, задать длительность стадии молекулярного облака равной $2 \cdot 10^5$ лет при температуре 10 К, а затем промоделировать вспышку светимости в вышеупомянутых областях протопланетного диска (с тем изменением, что в экстремально внешней области температура будет равна 10 К, как на стадии молекулярного облака и как в [5]), то результаты в целом совпадут с результатами, полученными в основной трёхфазной модели, и для большинства соединений разница содержаний в этих двух моделях на протяжении времени эволюции диска не будет превышать порядка величины. Когда разница обилий для

некоторого компонента всё же превышает порядок величины (например, для СО в экстремально внешней области), качественная картина поведения содержаний до, во время и после вспышки обычно сохраняется. Тем не менее, более двух десятков соединений, оказавшиеся потенциальными индикаторами вспышек светимости в основной модели, не будут таковыми в новой модели; среди них газофазный метанол в экстремально внешней области. Модель с $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.3$ также предлагает более 30 новых потенциальных индикаторов вспышечной активности. В основном это адсорбированные вещества, а из газофазных компонентов новыми индикаторами оказались C_2H_2 во внутренней области, C_2H_6 , атомарный азот и некоторые его соединения в экстремально внешней области. Экстремально внешняя область наиболее богата на различия между двумя трёхфазными моделями, поскольку в данной области в этих моделях существенно различается температура: 16 К в основной модели и 10 К в модели с $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.3$.

Таблица 1.4: Различия в потенциальных индикаторах вспышек светимости для трёхфазных моделей с разными $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$. Выделение шрифтом: см. текст.

Внутренняя область

$E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$	0.5	0.3	0.5	0.3	0.5	0.3
Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		После/до	
iC₉H₂	4.7(−11)	1.9(−11)	1.5(−10)	2.9(−10)	3.2	15.6
C₂H₂	2.1(−11)	1.5(−11)	5.6(−11)	1.5(−10)	2.7	10.2
продолжение следует						

$E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$	0.5	0.3	0.5	0.3	0.5	0.3
Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		После/до	
iSO_2	2.1(−10)	1.4(−09)	3.9(−09)	7.9(−09)	18.2	5.6
iHS	1.1(−10)	7.6(−11)	6.2(−10)	8.7(−10)	5.7	11.4
H_3^+	8.2(−12)	3.1(−12)	5.1(−13)	4.5(−13)	0.06	0.14
N_2H^+	6.9(−13)	1.0(−11)	1.5(−11)	1.5(−11)	22.5	1.4
NH	1.1(−13)	2.1(−12)	3.6(−12)	3.7(−12)	32.8	1.8
N	6.7(−14)	1.3(−12)	2.9(−12)	2.9(−12)	42.6	2.2
NH_2	5.3(−14)	9.5(−13)	2.2(−12)	2.3(−12)	42.1	2.4

Экстремально внешняя область

$E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$	0.5	0.3	0.5	0.3	0.5	0.3
Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		После/до	
iOH	1.0(−05)	1.1(−05)	4.2(−06)	3.2(−07)	0.42	0.03
iNO	2.0(−06)	1.4(−06)	7.9(−07)	4.7(−09)	0.39	3.4(−3)
iCH₂OH	5.2(−07)	6.4(−10)	4.2(−07)	2.7(−07)	0.82	420.7
N₂	5.5(−08)	1.2(−09)	4.7(−07)	1.6(−07)	8.6	124.7
iCH₃	3.6(−08)	1.0(−06)	5.4(−09)	1.1(−09)	0.15	1.1(−3)
iCH₂NH₂	3.5(−08)	4.1(−10)	3.2(−08)	4.1(−08)	0.91	100.0

$E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$	0.5	0.3	0.5	0.3	0.5	0.3
Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		После/до	
iCH₃NH	2.9(−08)	4.1(−10)	2.8(−08)	3.3(−08)	0.95	78.8
iHCO	2.4(−08)	8.6(−09)	3.2(−09)	2.6(−11)	0.13	3.0(−3)
iC₂N	1.7(−08)	1.0(−08)	1.7(−09)	2.6(−11)	0.10	2.5(−3)
iOCN	1.2(−08)	6.2(−09)	4.4(−09)	6.3(−11)	0.36	0.01
iCH₃OCH₃	1.0(−08)	2.0(−12)	1.1(−08)	1.2(−08)	1.03	6238.2
iC₂H₅OH	1.0(−08)	6.4(−13)	1.1(−08)	1.2(−08)	1.1	1.9(4)
iCH₃CHO	1.3(−09)	5.1(−12)	1.3(−09)	3.6(−09)	1.0	716.6
iCH₃C₃N	4.4(−10)	1.8(−11)	4.5(−10)	2.6(−09)	1.0	147.3
<i>iC₃O</i>	2.1(−10)	1.1(−09)	1.6(−08)	8.1(−09)	78.2	7.1
iCHNH	2.0(−10)	9.4(−14)	1.6(−10)	9.4(−10)	0.81	9964.8
<i>H₂S</i>	1.8(−10)	1.9(−10)	9.7(−12)	2.6(−11)	0.05	0.14
<i>iSO₂</i>	1.0(−10)	7.5(−10)	5.9(−09)	4.6(−09)	59.1	6.2
iCH₂	9.5(−11)	1.4(−06)	4.5(−10)	1.5(−09)	4.7	1.1(−3)
N	8.1(−11)	1.2(−11)	6.1(−10)	5.6(−10)	7.5	48.2
iS	3.6(−11)	1.8(−08)	3.2(−11)	4.1(−11)	0.88	2.3(−3)
NH₃	2.8(−11)	2.8(−12)	9.0(−11)	6.4(−11)	3.2	22.8
продолжение следует						

$E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$	0.5	0.3	0.5	0.3	0.5	0.3
Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		После/до	
CH_3OH	2.0(−11)	4.2(−12)	1.1(−12)	5.4(−12)	0.05	1.3
CH_2OH	1.9(−11)	4.2(−12)	3.1(−13)	2.1(−12)	0.02	0.51
NH₂	1.3(−11)	1.3(−12)	3.6(−11)	2.5(−11)	2.77	19.4
iO_2	9.1(−12)	2.2(−07)	5.5(−08)	6.1(−07)	6026.4	2.8
iC₂O	6.0(−12)	2.0(−11)	3.7(−11)	1.8(−13)	6.1	9.2(−3)
iH₂CN	4.7(−12)	6.2(−09)	1.4(−11)	1.0(−13)	2.9	1.6(−5)
iCH₃C₅N	2.0(−12)	1.4(−13)	2.1(−12)	8.7(−12)	1.0	63.6
iC_2S	1.8(−12)	1.4(−12)	1.8(−11)	6.1(−12)	10.3	4.4
NH₄⁺	4.2(−13)	2.2(−14)	1.1(−12)	4.2(−13)	2.7	19.1
HNO^+	3.2(−13)	8.7(−13)	1.8(−11)	1.6(−12)	57.2	1.9
$iHCS$	6.8(−14)	5.2(−14)	3.6(−12)	1.9(−13)	52.7	3.6
C₂H₆	6.3(−14)	5.0(−14)	7.4(−14)	7.5(−12)	1.2	150.2
iCH	9.2(−15)	1.8(−07)	4.1(−12)	4.2(−08)	449.0	0.23
iH₂	5.5(−15)	3.8(−08)	8.5(−16)	3.8(−12)	0.15	1.0(−4)
iN	1.9(−15)	4.6(−07)	2.5(−16)	3.1(−11)	0.13	6.7(−5)

Полный список потенциальных индикаторов вспышечной активности, которые в двух рассмотренных трёхфазных моделях не совпадают, можно найти в таблице 1.4. В ней **жирным шрифтом** отмечены компоненты, ко-

торые оказались индикаторами в модели с $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.3$, однако не были индикаторами в основной модели с $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.5$, а *курсивом* — соединения, которые были индикаторами в основной модели, но не оказались индикаторами в модели с $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.3$.

Необходимо также отметить, что энергии десорбции не обязаны быть одинаковыми для всех соединений на поверхности пыли (см., например, [47]). Во второй главе диссертации проводится исследование различных комбинаций $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ для атомарных и молекулярных соединений.

1.5. Заключение по Главе 1

- Введение многослойной структуры у ледяных мантий космических пылинок позволяет добиться близких к наблюдаемым содержаниям основных углеродсодержащих компонентов ледяных мантий ($i\text{CO}$, $i\text{CO}_2$, $i\text{CH}_3\text{OH}$) на стадии моделирования молекулярного облака. Варьирование параметров двухфазной модели не позволило достичь этого для всех упомянутых компонентов одновременно.
- Во внутренней области протопланетного диска рассматриваемые двух- и трёхфазная модели почти не демонстрируют различий в содержаниях химических соединений на всём времени моделирования. В более удалённых от звезды областях до начала вспышки модели в основном демонстрируют различия в содержаниях компонентов твёрдой фазы (важное исключение — газофазный метанол, которого в конце стадии молекулярного облака в трёхфазной модели почти на два порядка больше, чем в двухфазной).
- Трёхфазная модель предлагает большее (по сравнению с двухфазной) количество потенциальных индикаторов произошедших несколько сотен лет назад вспышек светимости молодой звезды — соединений, которые длительное время после вспышки сохраняют

нетипичные для спокойной довыспышечной стадии содержания в протопланетном диске. При этом почти все рассмотренные в работе компоненты, которые демонстрируют разницу до- и послевспышечных содержаний более порядка величины в какой-либо области диска в двухфазной модели, демонстрируют разницу содержаний более порядка величины в этой же области диска и в трёхфазной модели. Единственное исключение — адсорбированный формамид ($i\text{NH}_2\text{CHO}$) в промежуточной области диска.

- Трёхфазная модель подтверждает упомянутый в [6] формальдегид H_2CO как потенциальный индикатор недавно произошедших вспышек светимости, однако здесь, в отличие от [5], он является индикатором только до времени порядка 200 лет после окончания вспышки.
- Важные индикаторы вспышечной активности CO , CO_2 , CS , CN , HCN ведут себя схожим образом и в нашей трёхфазной модели, и в двухфазной модели [5]. В обеих этих моделях потенциальные индикаторы в основном сосредоточены в экстремально внешней области протопланетного диска. Наша двухфазная модель, аналогичная модели [5], но имеющая отличные от неё параметры (температура 16 К на стадии молекулярного облака и во время спокойной фазы в экстремально внешней области диска, время моделирования молекулярного облака 200 тысяч лет), предлагает меньше индикаторов, чем модель [5] или наша трёхфазная модель.

1.6. Положение, выносимое на защиту по результатам первой главы

- Показано, что трёхфазная астрохимическая модель, в отличие от двухфазной, позволяет добиться близких к наблюдаемым концентраций основных углеродсодержащих компонентов ледяных мантий ($i\text{CO}$, $i\text{CO}_2$, $i\text{CH}_3\text{OH}$) на стадии моделирования молекулярного обла-

ка. Показано, что во внешних областях протопланетного диска трёх-
фазная модель предлагает большее количество потенциальных инди-
каторов произошедшей вспышки светимости, чем двухфазная.

Глава 2.

2.1. Введение

В настоящее время считается, что важную роль в синтезе сложных органических молекул (СОМ) играют процессы, происходящие в адсорбированном веществе [48]. Однако в традиционном варианте диффузионной химии это предположение сталкивается с трудностями. Частицы тяжелее атомарного и молекулярного водорода при низких температурах, характерных для внутренних областей дозвёздных ядер (< 10 К), будут практически неподвижны, поэтому скорости диффузионных реакций между ними оказались бы пренебрежимо малы.

Результаты моделирования из работы [29], основанной на экспериментальных данных [30, 31], подтверждают, что поверхностная химия может играть ключевую роль в образовании сложных органических соединений (СОМ) в холодном плотном молекулярном газе. Химические реакции между радикалами, ведущие к образованию СОМ, способны эффективно идти при температурах около 10 К, поскольку в некоторых случаях радикалы-реагенты оказываются на пылевых частицах близко друг к другу как продукты других процессов, эффективных при 10 К. Реакции между ними в таких случаях будут проходить недиффузионно.

Базовая математическая формулировка недиффузионной поверхностной химии, подходящая для включения в модели химической кинетики, была предложена в [29]. Эти авторы исследовали роль недиффузионной химии в формировании СОМ в дозвёздном ядре L1544 [29], а также в образовании ледяных мантий межзвёздных пылинок в протозвезде класса 0 Cha-MMS1 и в образовании СОМ в горячих ядрах [49]. Их новые модели в

целом успешно воспроизводят наблюдаемые концентрации СОМ в газовой фазе и типичный состав межзвёздного льда. Однако в случае дозвёздного ядра L1544 у модели из [29] наблюдаются сложности в воспроизведении наблюдательно полученных [18] радиальных профилей метанола и других СОМ. Интересно, что в [29] также сделан вывод о несущественном вкладе газофазной химии в образование СОМ в дозвёздном ядре L1544. Это контрастирует с более ранней работой [10], где утверждалось, что газофазные реакции играют важную роль в образовании СОМ в этом же дозвёздном ядре.

Важным фактором, обеспечивающим связь газовой и твёрдой фаз, является реактивная десорбция (РД) — выброс продуктов экзотермической поверхностной реакции в газовую фазу благодаря энергии, высвобождаемой в реакции. Количественное описание этого процесса затруднено, поскольку его эффективность зависит от многих факторов, включая свойства поверхности, энергию связи, число атомов в продукте реакции и т.д. В модели из работы [10] использована параметризация РД, предложенная в [50] на основе новаторской серии экспериментов [51, 52]. Выражение для эффективности реактивной десорбции (то есть для доли продуктов реакции, которая отправится в газовую фазу), предложенное в [50], предсказывает широкий диапазон эффективности для различных поверхностных реакций, включая в некоторых случаях большие значения (5% и выше). Например, перепроизводство газофазного формальдегида в работе [10], вероятно, связано с высокой эффективностью РД для CH_3 и самого H_2CO . Большая концентрация газофазных O_2 и H_2O обусловлена экстремально высокой эффективностью РД ($>60\%$) в поверхностной реакции $\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{O}_2$. Некоторые другие соединения, например H_2S , в модели [10] также имеют каналы образования в твёрдой фазе с высокой эффективностью РД ($> 10\%$).

Кроме параметризации РД, предложенной в [50], существуют и другие её параметризации — см., например, [23, 53, 54]. При этом в более позд-

них работах сообщается, что уровень реактивной десорбции в среднем более низок, а разброс значений её эффективности не столь широк [55–58]. Оценка эффективности РД варьируется в диапазоне 1–3%. Уточнив наши представления о реактивной десорбции и продемонстрировав повсеместную распространённость этого явления, вышеупомянутые работы также подтвердили, что количественное описание эффективности РД всё ещё связано со значительной неопределённостью. Таким образом, следует с осторожностью включать экспериментальные данные по РД в астрохимическое моделирование, и разумным представляется рассматривать более консервативную параметризацию РД, описанную в [53], что и сделано в настоящей работе. Интересно, что РД оказывается ключевым механизмом независимо от того, газофазная или поверхностная химия отвечает за образование СОМ в дозвёздных ядрах. В первом случае реактивная десорбция доставляет прекурсоры СОМ в газ. Во втором случае, если СОМ сами формируются на пыли, они тоже должны быть каким-либо образом доставлены в газ. В холодной, тёмной и плотной среде дозвёздных облаков РД — перспективный кандидат для объяснения этого перехода.

В настоящей работе исследуется влияние недиффузионных химических процессов в ледяных мантиях межзвёздных пылинок на формирование СОМ в газе и во льду в условиях, типичных для дозвёздных ядер. С этой целью в астрохимический код MONACO было добавлено описание недиффузионных химических процессов. Затем обновлённый код применялся для расчётов химии в статичной одномерной физической модели дозвёздного ядра L1544 — той же модели, что использовалась в более раннем исследовании химии СОМ в данном дозвёздном ядре [10]. Это позволяет сравнить новые результаты с полученными в [10] и таким образом пересмотреть роль газофазных и поверхностных химических процессов в образовании СОМ в дозвёздных ядрах.

2.2. Модель

2.2.1. Трёхфазный код с недиффузионной химией

Астрохимическая модель, которая использовалась в данной главе, основана на трёхфазном коде MONACO, описанном в [10], где по отдельности рассматриваются газовая фаза, ближайшие к поверхности слои ледяных мантий межзвёздных пылинок и толща ледяной мантии. Для описания химии в каждой из трёх фаз решаются уравнения химической кинетики. В исходную модель было внесено несколько важных изменений, а именно внедрение недиффузионной химии на поверхности и в толще ледяной мантии, зависимость энергии связи Н и Н₂ от содержания молекулы Н₂ в поверхностных слоях льда, а также конкуренция реакция-диффузия (reaction-diffusion competition) для химических процессов в твёрдой фазе, обладающих барьером активации. Как и в других аналогичных моделях (в том числе, в модели из Главы 1 настоящей работы), газофазные уравнения химической кинетики даются выражением:

$$\begin{aligned} \frac{dn_i^{\text{gas}}}{dt} = & \sum_{j,l} k_{jl}^{\text{gas}} n_j^{\text{gas}} n_l^{\text{gas}} - n_i^{\text{gas}} \sum_j k_{ij}^{\text{gas}} n_j^{\text{gas}} + \\ & \sum_j k_{\text{ext},j}^{\text{gas}} n_j^{\text{gas}} - k_{\text{ext},i}^{\text{gas}} n_i^{\text{gas}} - k_{\text{ads},i} n_i^{\text{gas}} + R_{\text{des},i}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

где $n_{i(j,l)}^{\text{gas}}$ — это газофазная концентрация (см⁻³) компонента $i(j,l)$, k_{ij} и k_{jl} — коэффициенты скоростей для газофазных двухчастичных реакций, $k_{\text{ext},i}$ и $k_{\text{ext},j}$ — коэффициенты скоростей для реакций, обусловленных внешними факторами (ионизация космическими лучами, фотоионизация, индуцированные космическими лучами фотореакции), $k_{\text{ads},i}$ — коэффициент скорости адсорбции для i -го компонента, и $R_{\text{des},i}$ — скорость его десорбции.

В модель включены следующие процессы десорбции: тепловое испарение; десорбция, индуцированная космическими лучами [59]; фотодесорб-

ция, индуцированная космическими лучами [60]; фотодесорбция и реактивная десорбция. Выход фотодесорбции на поглощённый фотон составляет 10^{-5} частиц для всех компонентов, кроме CO [61, 62]. Для монооксида углерода взято значение 10^{-2} [63]. Более детально влияние выхода фотодесорбции на результаты моделирования обсуждается в [64].

Химические процессы в поверхностных слоях ледяной мантии пылинок и в её толще задаётся уравнениями

$$\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt} = \left(\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt} \right)^{\text{chem}} - \left(\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt} \right)^{\text{tran}} - R_i^{\text{diff},s2b}, \quad (2.2)$$

$$\frac{dn_i^{\text{bulk}}}{dt} = \left(\frac{dn_i^{\text{bulk}}}{dt} \right)^{\text{chem}} + \left(\frac{dn_i^{\text{sur}}}{dt} \right)^{\text{tran}} - R_i^{\text{diff},b2s}. \quad (2.3)$$

Здесь n_i^{sur} — это концентрация i -го компонента в поверхностных слоях льда, а n_i^{bulk} — концентрация i -го соединения в толще мантии. Первое слагаемое в правой части уравнения (2.2) описывает эволюцию концентрации компонента i вследствие химических реакций на поверхности пыли, адсорбции и десорбции. В уравнении (2.3), соответственно, первое слагаемое включает в себя химические реакции в толще льда. Второе и третье слагаемые в уравнениях (2.2) и (2.3) описывают перераспределение частиц между поверхностными слоями и толщей ледяной мантии пыли. Второе слагаемое ответственно за переопределение того, какие частицы относятся к веществу верхних слоёв мантии, а какие — к её толще, его структура полностью аналогична структуре второго слагаемого из уравнений (1.5) и (1.6) Главы 1; см. также выражения (4) и (5) в [10]. Третье слагаемое в (2.2) и (2.3) описывает тепловую диффузию материала между поверхностными слоями и толщей льда. Здесь использовано базовое выражение, приведённое в [9], хотя существует и более детально разработанный подход [65]. Однако при низкой температуре пыли, типичной для дозвёздных ядер, скорость подобной диффузии будет низка и не окажет существенного влияния на

результат моделирования.

В данной работе рассматриваются как диффузионные, так и недиффузионные химические реакции в твёрдой фазе. Диффузионный механизм подразумевает, что реакция происходит при столкновении двух частиц друг с другом в результате случайного блуждания. Иными словами, как минимум один из реагентов должен быть мобилен в интересующих нас физических условиях. Предполагается, что при температуре пыли ниже 10 К, типичной для дозвёздных ядер, только атомарный и молекулярный водород достаточно подвижны благодаря низкой энергии связи с поверхностью пыли или, быть может, благодаря квантовому туннелированию сквозь потенциальные барьеры между сайтами связывания. Однако возможна ситуация, когда оба реагента оказываются близко друг к другу, уже готовые прореагировать. Они могут быть продуктами предшествующих химических процессов или аккрецировать на пыль из газа. В таком случае, для осуществления реакции мобильность реагентов не требуется, и реакции между химическими соединениями тяжелее Н и Н₂ — такими, как радикалы, — будут происходить и при низких температурах.

Диффузионные химические процессы в первом слагаемом уравнений (2.2) и (2.3) могут быть описаны аналогично газофазным реакциям в уравнении (2.1) или же с использованием модифицированных уравнений химической кинетики [66, 67]. Недиффузионные реакции на поверхности и в толще льда представлены согласно подходу [29]. Выражение для скорости недиффузионной химической реакции таково:

$$R_{AB} = f_{\text{act}}(AB)R_{\text{comp}}(A)\frac{N_B}{N_S} + f_{\text{act}}(AB)R_{\text{comp}}(B)\frac{N_A}{N_S}, \quad (2.4)$$

где $f_{\text{act}}(AB)$ — ограниченная барьером активации (при его наличии) эффективность реакции, вычисленная с учётом конкуренции реакция-диффузия (см. ниже), N_A и N_B — среднее число частиц каждого из ре-

агентов на одной пылинке, N_S — число сайтов связывания на поверхности усреднённой пылинки, и $R_{\text{comp}}(i)$ — так называемая “скорость завершения” (completion rate) для i -го компонента. Скорость завершения — это обратная величина к сумме временных шкал для всех шагов реакционного процесса, который начинается с появления реагента на пыли и завершается событием недиффузионной реакции:

$$R_{\text{comp}}(A, B) = \frac{1}{1/R_{\text{app}}(A, B) + t_{AB}}. \quad (2.5)$$

Здесь t_{AB} — временная шкала для любого события, которое может произойти с частицами А и В, когда они находятся в конфигурации, подходящей для осуществления реакции. $R_{\text{app}}(A, B)$ — “скорость появления” (“appearance rate”) для частицы А или В, то есть сумма скоростей всех процессов, которые “доставляют” реагент А или В на пылинку [29]. Такими процессами могут быть адсорбция из газа, фотореакции во льду, диффузионные реакции во льду и т.д.

Авторы [29] предлагают осуществлять три раунда недиффузионных реакций. Они указывают, что влияние недиффузионных процессов на содержания химических соединений существенно ослабевает уже после второго раунда. В нашей модели влияние недиффузионных процессов после третьего раунда оказывается пренебрежимо мало, поэтому число раундов было выбрано равным 3.

Как уже говорилось, эффективность реакции $f_{\text{act}}(AB)$ для твердофазных процессов, обладающих активационным барьером, рассчитывается с учётом так называемой “конкуренции реакция-диффузия”. Эффективно наличие барьера активации означает, что при любом единичном столкновении реагентов вероятность события реакции ниже единицы. Когда оба реагента оказываются близко друг к другу, конкурируют два возможных пути: либо произойдёт реакция, либо частицы в результате диффузии от-

даются друг от друга. Результирующая вероятность реакции между частицами А и В, таким образом, составляет [32]:

$$f_{\text{act}}(AB) = \frac{\nu_{AB}\kappa_{AB}}{\nu_{AB}\kappa_{AB} + k_{\text{hop}}(A) + k_{\text{hop}}(B)}, \quad (2.6)$$

где ν_{AB} — наиболее высокая из вибрационных частот для компонентов А и В, а $k_{\text{hop}}(A)$ и $k_{\text{hop}}(B)$ — скорости тепловой диффузии для А и В, соответственно.

В отличие от модели [10], в настоящей работе молекулярному водороду позволяет аккрецировать на пыль. В самом деле, H_2 — наиболее обильное соединение в молекулярных облаках с содержанием в 10^4 раз выше, чем у второй по распространённости газовой молекулы, оксида углерода CO (при отсутствии его вымораживания). Поэтому скорость адсорбции H_2 должна быть высока. Поскольку температура в тёмных областях дозвёздных ядер, вероятнее всего, ниже 10 К (см., например, [24]), стоит ожидать значительного содержания H_2 на поверхности пыли несмотря на низкую энергию связи этой частицы с поверхностью. Более того, в рамках моделирования можно получить нефизичный результат полного вымораживания молекулярного водорода из газовой фазы и гигантские ледяные мантии, состоящие в основном из твёрдого H_2 .

Чтобы избежать полного вымораживания H_2 при низких температурах, в настоящей модели энергии десорбции H и H_2 изменяются в соответствии с составом поверхностных слоёв льда — а именно с долей поверхности, покрытой молекулярным водородом, согласно подходу из [8]. Следуя работе [68], авторы [8] отметили, что энергия связи частиц на смешанном льду, состоящем из H_2 и H_2O , слабее, чем на поверхности, состоящей из чистого водяного льда. Поскольку по оценкам [68] энергия связи с поверхностью из H_2 примерно в 10 раз меньше, чем с поверхностью из CO , в работе [8] предложено выражение для зависящей от времени “эффектив-

ной энергии десорбции”:

$$E_{\text{des,eff}} = E_{\text{des}} (1 - \theta(\text{H}_2)) + 0.1 E_{\text{des}} \theta(\text{H}_2). \quad (2.7)$$

Здесь $\theta(\text{H}_2)$ — доля поверхности пылинки, покрытая молекулярным водородом. Таким образом, энергия связи химических соединений становится в общем зависящей от времени. В [8] энергии десорбции для всех соединений корректировались с использованием выражения (2.7). Однако в нашей модели оно применено только к атомарному и молекулярному водороду. В случае остальных компонентов такая коррекция остаётся под вопросом, поскольку возможно, что более тяжёлые соединения проникают сквозь слой H_2 и связываются с частицами под ним.

Диффузионная химия в глубинных слоях ледяных мантий также трактуется аналогично [10], за исключением химических реакций с атомарным и молекулярным водородом. В [10], следуя [9], предполагается, что все те диффузионные химические реакции, которые происходят на поверхности пыли, идут и в толще льда благодаря процессу диффузионных прыжков (“swapping”). Скорость прыжков рассчитывалась аналогично скорости тепловой диффузии, но в предположении, что энергетический барьер для прыжков частицы в толще мантии в два раза выше, чем её энергия связи на поверхности. В настоящей работе этот подход сохраняется, однако предполагается, что барьер для прыжков H и H_2 лишь в 1.5 раза выше, чем их энергия связи на поверхности. Атомы и молекулы водорода геометрически меньше других частиц, что способно привести к более высокой мобильности H и H_2 в толще ледяной мантии по сравнению с другими частицами.

Химические процессы на поверхности и в толще льда, индуцированные космическими лучами и ультрафиолетовыми фотонами, описываются так же, как в газовой фазе. Сечения взаимодействия фотопроцессов на поверхности равны соответствующим сечениям взаимодействия в газовой

фазе. Заметим, однако, что скорости фотодиссоциации во льду могут быть меньше, чем соответствующие скорости в газовой фазе (например, [69, 70]). Радиолиз межзвёздных льдов и их лабораторных аналогов интенсивно изучается в последние годы [21, 71–75]. Результаты этих работ предполагают, что влияние космических лучей на химию межзвёздных льдов сложнее, чем описано в нашей модели. С другой стороны, авторы [72] считают, что в плотных тёмных облаках значительные изменения состава льдов под воздействием космических лучей требуют времён порядка $\sim 10^7$ лет. При этом динамическая и химическая шкалы эволюции дозвёздных ядер примерно на один-два порядка меньше. Таким образом, упрощённый подход к воздействию космических лучей на межзвёздные льды был сочтён достаточным для данной работы.

2.2.2. Физическая модель ядра L1544, начальные условия и параметры химии

Физическая модель дозвёздного ядра L1544 и начальные условия подобны тем, что использовались в [10]. В частности, моделирование проводится для статичного одномерного радиального профиля плотности газа, а также температуры газа и пыли, полученного в [24] (рисунок 2.1). В недавних исследованиях был предложен несколько отличный от данного профиль физических параметров L1544 [76]. Различия между этими двумя вариантами и релевантность использования профиля, предложенного в [24], детально обсуждается в [77]. Ядро L1544 погружено в молекулярное облако [78], поэтому поглощение в оптическом диапазоне на его краю в нашей модели составляет 2 mag. Профиль физических условий содержит 128 радиальных точек, в каждой из которых химическая эволюция рассчитывается отдельно с помощью одноточечной модели MONACO. Начальные содержания для расчёта химии одинаковы в каждой точке и представляют собой финальную композицию “полупрозрачного облака” спустя 10^6 лет

эволюции. Полупрозрачное облако в нашей модели характеризуется плотностью газа 10^3 см^{-3} и поглощением в оптическом диапазоне $A_V = 2.0 \text{ mag}$. В течение 10^6 лет эволюции температуры газа и пыли в облаке линейно падают с 15 К до 10 К. В качестве начальных выбраны атомарные “низкометаллические” содержания, перечисленные в таблице 1 из [79]. Водород изначально находится в молекулярной форме.

Поверхностная химия в холодной тёмной среде в основном контролируется подвижностью частиц. В классических газопылевых астрохимических моделях рассматривается только диффузионная химия на поверхности пыли (например, [32]), отчего скорость диффузии частиц оказывается естественным ограничивающим параметром. В новых моделях твердофазной химии, содержащих недиффузионные процессы, скорость диффузии может оказаться не столь критичной. Тем не менее, она всё ещё играет важную роль, поскольку определяет относительную значимость диффузионных и недиффузионных процессов, происходящих одновременно. В данной работе предполагается, что все частицы диффундируют по поверхности и внутри толщ мантии исключительно посредством тепловых прыжков. Всё ещё остаётся спорным вопрос, какова роль квантового туннелирования в диффузии атомарного и молекулярного водорода при низких температурах (например, [80–83]). Однако вероятно, что перемещение атомов Н на поверхности из аморфного водяного льда происходит намного медленнее, чем предсказано простыми моделями туннелирования через прямоугольные потенциальные барьеры [32], даже если квантовое туннелирование сквозь барьеры диффузии действительно вносит вклад в его скорость наряду с тепловой диффузией [84, 85]. Таким образом, в настоящей модели было решено рассматривать только тепловую диффузию Н и Н₂.

Скорости тепловой диффузии в моделях, основанных на уравнениях химической кинетики, как правило, контролируются отношением энергии диффузии частицы к её энергии десорбции, $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$. В целом не суще-

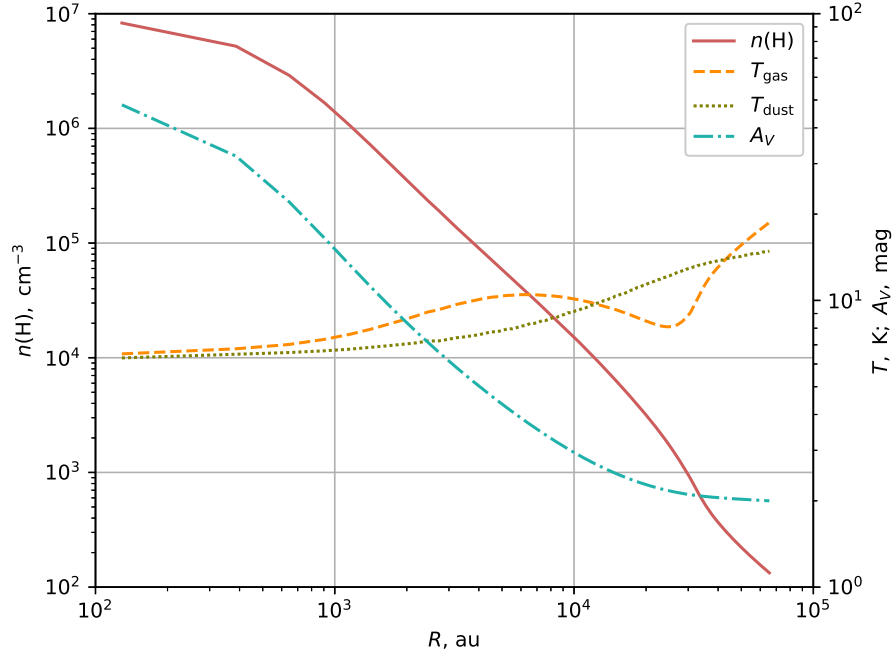


Рис. 2.1. Радиальные профили физических условий в L1544 из [24]. Температура пыли во внутренних областях ядра ниже 10 К.

ствуется фундаментальных физических аргументов в пользу универсальности значения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ для всех адсорбированных соединений [47]. С учётом этого, а также результатов [50] и [46], в нашей модели было принято $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.5$ для атомарных частиц и $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.3$ для молекулярных соединений. В разделе 2.3.5 обсуждается, как изменение этих параметров влияет на результаты моделирования.

В настоящей работе сравниваются две модели с различной параметризацией реактивной десорбции (РД). Первая основана на RRK-теории (Rice-Ramsperger-Kessel) и представлена в астрохимическом контексте в работе [53]. Здесь и далее она упоминается как модель с десорбцией по Гэрроду или модель GRD. Значение параметра a в выражении (2) из [53] для вероятности реактивной десорбции взято равным 0.01. Другая рассмотренная нами параметризация реактивной десорбции основана на экспериментальных результатах [50] (здесь и далее упоминается как модель с десорбцией по Миниссале или модель MRD). Эта параметризация применя-

лась в работе [10] и недавно была обновлена в [86]. В настоящей работе она используется со значением эффективной массы элемента поверхности M , равным 100 а.е.м. Следует заметить, что для обоих вариантов реактивной десорбции веществу позволяет десорбировать только с той части поверхности пылинки, которая не покрыта водяным льдом, — согласно обсуждению из [10].

2.2.3. Обновления в сетке реакций

Сетка химических реакций, использованная в данной работе, преимущественно основана на той сетке, которая представлена в [17]. Однако в неё внедрены существенные обновления согласно последним экспериментальным данным и теоретическим расчётам.

Во-первых, была расширена химия гидрирования CO в адсорбированном веществе. Реакции присоединения водорода, ведущие к последовательному превращению CO в метанол (CH_3OH) через интермедиаты (HCO , H_2CO , $\text{CH}_3\text{O}/\text{CH}_2\text{OH}$), дополнены реакциями абстракции водорода согласно [29] (см. таблицу 2.1). Заметим, что существуют и другие значения параметров реакций из цепочки превращения CO в метанол. Их влияние обсуждается в разделе 2.4.2. Также в сетку была включена реакция между метокси-радикалом и формальдегидом, в которой производится метанол ($\text{gCH}_3\text{O} + \text{gH}_2\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH} + \text{gHCO}$), с барьером активации 2670 К, предложенным в [87], и аналогичная ей реакция в толще мантии. Как и в главе 1, здесь и ниже префикс “g” обозначает компоненты поверхностных слоёв ледяных мантий, префикс “b” — частицы из толщи мантии, а префикс “i” используется при упоминании общего числа частиц данного компонента в ледяной мантии (“i” = “g” + “b”).

Недавно в работе [88] было показано, что формальдегид (H_2CO) — молекула, которая может быть на пыли конвертирована в метанол двумя последовательными присоединениями атома водорода, — способна образо-

Таблица 2.1. Образование метанола на пыли. Параметры для присоединения и абстракции водорода взяты из [29].

Реакция	Барьер (Å)	E_{act}
$\text{gH} + \text{gCO} \rightarrow \text{gHCO}$	1.35	2320
$\text{gH} + \text{gHCO} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$	1.00	0
$\text{gH} + \text{gH}_2\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_2\text{OH}$	1.35	4500
$\text{gH} + \text{gH}_2\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{O}$	1.35	2320
$\text{gH} + \text{gCH}_2\text{OH} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH}$	1.00	0
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH}$	1.00	0
$\text{gH} + \text{gHCO} \rightarrow \text{gCO} + \text{gH}_2$	1.00	0
$\text{gH} + \text{gH}_2\text{CO} \rightarrow \text{gHCO} + \text{gH}_2$	1.22	2960
$\text{gH} + \text{gCH}_2\text{OH} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO} + \text{gH}_2$	1.00	0
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO} + \text{gH}_2$	1.00	0
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{OH} \rightarrow \text{gCH}_2\text{OH} + \text{gH}_2$	1.00	4380
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{OH} \rightarrow \text{gCH}_3\text{O} + \text{gH}_2$	1.00	6640
$\text{gCH}_3\text{O} + \text{gH}_2\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH} + \text{gHCO}$	–	2670 [87]
$\text{gC} + \text{gH}_2\text{O} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$	–	0 [88]

ываться в реакции $\text{gC} + \text{gH}_2\text{O} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$. Эта реакция может эффективно идти прежде “катастрофического вымораживания” CO на пыль, таким образом способствуя производству метанола и других СОМ на ранних стадиях формирования дозвёздных ядер. С учётом двухстадийной структуры нашей модели (см. раздел 2.2.2) эта реакция была включена в химическую сетку.

Во-вторых, в настоящей модели были обновлены способы формирования других СОМ. В качестве пути образования твердофазного ацетальдегида включена цепочка реакций, предложенная в [89] (см. рисунок 3 в указанной работе). Таблица 2.2 содержит реакции из этой цепочки. В работе [10] ацетальдегид преимущественно формировался в газофазной реакции $\text{CH} + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO} + \text{H}$. Константы скорости для этой реакции взяты из [90], однако там они были получены при высоких температурах (298–753 К) и давлениях (100–600 торр), что далеко от условий,

Таблица 2.2. Цепочка образования ацетальдегида на пыли. Значения E_{act} приведены по [89], внутри даны ссылки на источники, упомянутые в [89].

Реакция	Барьер (Å)	E_{act}
$\text{gC} + \text{gCO} \rightarrow \text{gCCO}$	—	0 [94]
$\text{gH} + \text{gCCO} \rightarrow \text{gHC}_2\text{O}$	1.00	0
$\text{gH} + \text{gHC}_2\text{O} \rightarrow \text{gCH}_2\text{CO}$	1.00	0
$\text{gH} + \text{gCH}_2\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CO}$	1.00	975 [95]
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CHO}$	1.00	0

типичных для дозвёздных ядер. Наша обновлённая модель демонстрирует результаты, близкие к наблюдательным данным, и без включения данной реакции, поэтому она была удалена из сетки. Также была исключена реакция $\text{gN} + \text{gCH}_2\text{OH} \rightarrow \text{gNH}_2\text{CHO}$. Хотя она присутствует в астрохимической базе KIDA [91] с пометкой о происхождении из газофазно-поверхностного кода OSU группы Эрика Хербста от 2006 года, это, вероятно, неэффективный путь производства формамида вследствие разницы в химической структуре CH_2OH и NH_2CHO . Для газофазной реакции $\text{NH}_2 + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{NH}_2\text{CHO} + \text{H}$ в [10] использовались константы скорости, предложенные в [92]. Однако в недавней работе [93] высказали предположение, что при температуре ниже 110 К вероятность данного канала реакции эффективно равна нулю, поэтому в текущей сетке эта реакция исключена.

В дополнение к эффективным недиффузионным путям образования метилформиата (HCOOCH_3), диметилового эфира (CH_3OCH_3) и ацетальдегида (CH_3CHO) — радикал-радикальным реакциям на пыли $\text{HCO} + \text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{HCOOCH}_3$, $\text{CH}_3 + \text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_3$ и $\text{CH}_3 + \text{HCO} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO}$ [96] — согласно [29], в сетку также были добавлены петли присоединения/абстракции водорода для этих компонентов. Барьеры реакций абстракции H (E_{act}) взяты из [9] и [29] (Таблица 2.3). Реакции присоединения водорода, в результаты которых формируются упомянутые СОМ, не имеют барьеров активации.

Прекурсор метилформиата CH_3OSO и метилизоцианат CH_3NCO —

Таблица 2.3. Реакции абстракции водорода для СОМ. Барьеры и энергии активации приведены по [9, 29]. Внутри даны ссылки на источники, упомянутые в данных работах.

Реакция	Барьер (Å)	E_{act}
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{CHO} \rightarrow \text{gH}_2 + \text{gCH}_3\text{CO}$	1.00	2120 [97]
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{OCH}_3 \rightarrow \text{gCH}_3\text{OCH}_2 + \text{gH}_2$	1.00	4450 [98]
$\text{gH} + \text{gHCOOCH}_3 \rightarrow \text{gH}_2 + \text{gCH}_3\text{OCO}$	1.00	3970 [99]

новые соединения в нашей сетке, поэтому набор реакций с ними и их положительными ионами был включён в сетку (Таблица 4.1 в Приложении 2). Коэффициенты скоростей данных реакций рассчитываются по модифицированной формуле Аррениуса.

В [100] было показано, что наряду с реакциями присоединения атомарного водорода [101] реакции с молекулярным водородом также важны для гидрирования атомов углерода до метана на межзвёздных пылинках. Барьеры активации в настоящей модели обновлены согласно результатам [100] (см. таблицу 2.4). В [100] отмечено, что энергия активации реакции $\text{gC} + \text{gH}_2 \rightarrow \text{gCH}_2$ существенно зависит от содержимого сайтов связывания, соседних с тем, в котором находится атом углерода. Например, вблизи тримера H_2O атом углерода связан сильнее, чем вблизи одной молекулы воды. В нашей модели выбрана минимальная энергия связи из предложенных в [100], равная 30 кДж/моль (3600 K).

В предыдущих моделях формирования СОМ в холодных облаках [10, 28] предполагалось, что реакция радиативной ассоциации между радикалами CH_3 и CH_3O ($\text{CH}_3 + \text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_3$) играет ключевую роль в образовании диметилового эфира. Скорости реакций радиативной ассоциации известны плохо, и в [28] и [10] скорость данной реакции при 10 K была принята равной 3×10^{-10} см³/с. Однако недавно в [102] исследовали газофазный путь образования диметилового эфира путём радиативной ассоциации CH_3 и CH_3O и рассчитали коэффициент скорости двумя способами — каноническим и методом фазового пространства — предложив кон-

Таблица 2.4. Образование метана на пыли.

Реакция	Барьер ($\text{\AA}$)	E_{act}
$\text{gC} + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}$	1.00	0
$\text{gCH} + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_2$	1.00	0
$\text{gCH}_2 + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_3$	1.00	0
$\text{gCH}_3 + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_4$	1.00	0
$\text{gC} + \text{gH}_2 \rightarrow \text{gCH}_2$	1.00	3600
$\text{gCH} + \text{gH}_2 \rightarrow \text{gCH}_3$	1.00	0
$\text{gCH}_2 + \text{gH}_2 \rightarrow \text{gCH}_3 + \text{H}$	1.00	5900
$\text{gCH}_3 + \text{gH}_2 \rightarrow \text{gCH}_4 + \text{H}$	1.00	5300

станты скорости для модифицированной формулы Аррениуса. При расчёте нашим кодом не обнаружено существенной разницы результатов при применении двух данных наборов констант, и в настоящей модели используются константы, рассчитанные методом фазового пространства, поскольку авторы [102] утверждают, что они более точны. Их значения следующие: $\alpha = 1.37 \times 10^{-12} \text{ см}^3/\text{с}$, $\beta = -0.96$, $\gamma = 0.00$. В таком случае коэффициент скорости реакции при 10 К оказывается равен $3.6 \times 10^{-11} \text{ см}^3/\text{с}$, что почти на порядок ниже значения, использованного ранее в [10].

Энергии десорбции соединений, используемые в настоящей работе, совпадают с принятыми в [17], за исключением молекулярного водорода H_2 и атомарного углерода C. Для молекулярного водорода дано значение энергии десорбции, равное 380 К, что ближе к новым оценкам, приведённым в [103]. Энергия связи атомарного углерода принята равной 10000 К [104], поскольку атом углерода прикрепляется к поверхности из аморфного водяного льда посредством хемисорбции, а не физисорбции. В работе [103] предложены также преэкспоненциальные факторы (характеристические частоты гармонического осциллятора для химических соединений), рассчитанные с применением теории транзитного состояния (transitional state theory, TST). Однако в узком диапазоне температур пыли, характерных для модели ядра L1544 (7–15 К), эти факторы в сочетании с соответственно

Таблица 2.5. Резюме параметров модели.

Параметр	Значение
Скорость ионизации космическими лучами (с^{-1})	1.3(−17)
Выход фотодесорбции для СО (частиц/фотон)	1.0(−2) ^[63]
Выход фотодесорбции для других компонентов (частиц/фотон)	1.0(−5) ^{[61], [62]}
Размер пылинки (см)	1.0(−5)
Отношение массы газа к массе пыли	1.0(−2)
Поверхностная плотность сайтов на пыли (см^{-2})	1.5(+15)
Плотность пыли (г/см^3)	3.0
$E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$, атомарные частицы	0.5
$E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$, молекулярные соединения	0.3
$E_{\text{swap}}/E_{\text{diff}}$, атомы Н	1.5
$E_{\text{swap}}/E_{\text{diff}}$, другие соединения	2.0
Число “поверхностных” монослоёв	4 ^[23]
Число раундов для трёхчастичных недиффузионных реакций	3 ^[29]
Туннелирование сквозь барьеры диффузии	Выкл. ^[29]
Конкуренция реакция-диффузия	Вкл. ^[8]
Туннелирование сквозь барьеры реакций	Вкл.

скорректированными энергиями десорбции крайне мало влияют на химию адсорбированных соединений. Поэтому значения энергий десорбции и пре-экспоненциальных факторов из [103] в настоящей работе систематически не используются.

2.3. Результаты

2.3.1. Определение согласия результатов моделирования и наблюдательных данных

Сравнение результатов моделирования с наблюдениями требует некоего формального подхода. Ниже описан метод, использованный в данной

работе. Сначала он применяется для сравнения результатов модели GRD с наблюдаемыми содержаниями газофазных СОМ в L1544, а затем, в разделе 2.3.4, он используется для сравнения результатов модели MRD с теми же наблюдениями.

Как и в [10], чтобы определить диапазон времени эволюции, в течение которого будет релевантным сравнение наблюдательных и модельных концентраций, степень вымораживания СО (СО depletion factor) в центре дозвёздного ядра сравнивается с наблюдаемым значением, полученным в [105]. Согласно этим данным, СО испытывает значительное вымораживание на пыль в центральных областях ядра L1544 — они оценивают наблюдаемую степень вымораживания СО как ~ 10 в направлении на пылевой пик (центр ядра). При определении содержаний химических соединений в наблюдениях часто используют отношение лучевой концентрации данного компонента X к лучевой концентрации водорода, $N(X)/N(\text{H}_2)$. На рисунке 2.2 представлена эволюция во времени отношения лучевых концентраций СО и H_2 в нашей модели GRD; здесь и далее лучевая концентрация любого газофазного соединения свёрнута с функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа IRAM из наблюдений [18] с $\text{FWHM} = 26.9''$. Закрашенным прямоугольником показана область двукратной неопределённости для наблюдаемого содержания СО. В нашей модели наблюдаемый уровень вымораживания СО достигается в момент времени $\sim 1.2 \cdot 10^5$ лет. С учётом неопределённости наблюдательного значения допустимая степень вымораживания СО покрывает диапазон от $\sim 4.0 \cdot 10^4$ лет до $\sim 4.0 \cdot 10^5$ лет.

Для сравнения результатов моделирования с наблюдениями были построены карты согласия в фазовом пространстве (t, R) , где t — момент времени в моделировании, а R — радиальная точка в сферически симметричной модели L1544. На левой панели рисунка 2.3 приведено сравнение модельных содержаний с наблюдаемыми по направлению на пылевой пик,

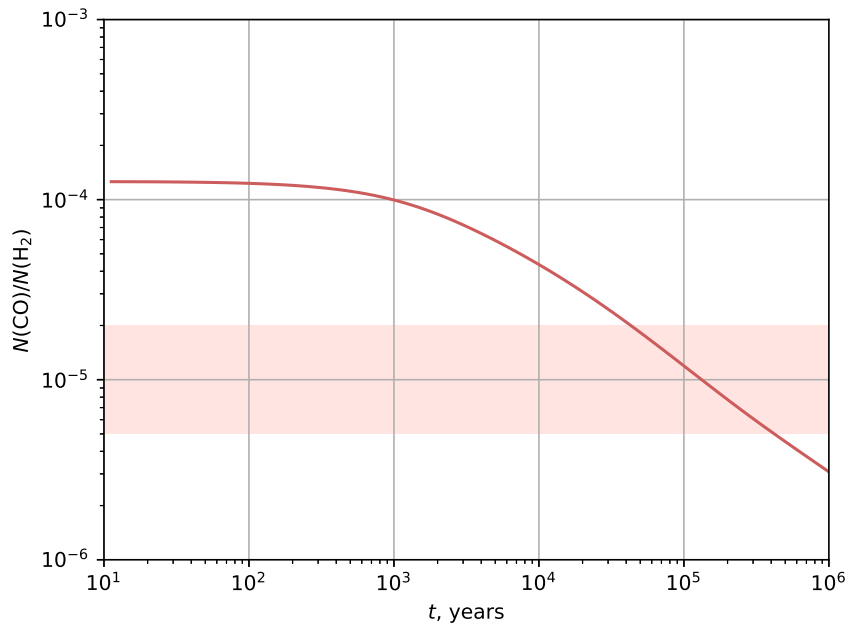


Рис. 2.2. Временная эволюция отношения лучевых концентраций CO и H₂ в моделировании. Закрашенным прямоугольником показана область двукратной неопределённости для наблюдаемого содержания CO [105].

на правой панели — с содержаниями в направлении на наблюдаемый пик концентрации метанола, расположенный на расстоянии 4000 а.е. от пылевого пика. Преимущественный интерес вызывают те области фазового пространства, где модельные содержания всех газофазных соединений, используемых для сравнения, — это, как и в модели [10], CH₃OH, CH₃O, CH₃CHO, HCOOCH₃, CH₃OCH₃ и NH₂CHO — находятся в согласии с наблюдениями. Под согласием понимается ситуация, когда модельные концентрации в определённый момент времени отличаются от наблюдаемых не более чем на порядок величины. Если же для наблюдаемого обилия установлен только верхний предел, модельные содержания считаются согласующимися с наблюдаемыми, когда они меньше наблюдаемого верхнего предела либо превосходят его не более чем на порядок величины. Области фазового пространства, где модельные содержания всех вышеупомянутых шести соединений находятся в согласии с наблюдениями, закрашены цветным. Области, в которых пять и менее соединений имеют модельные со-

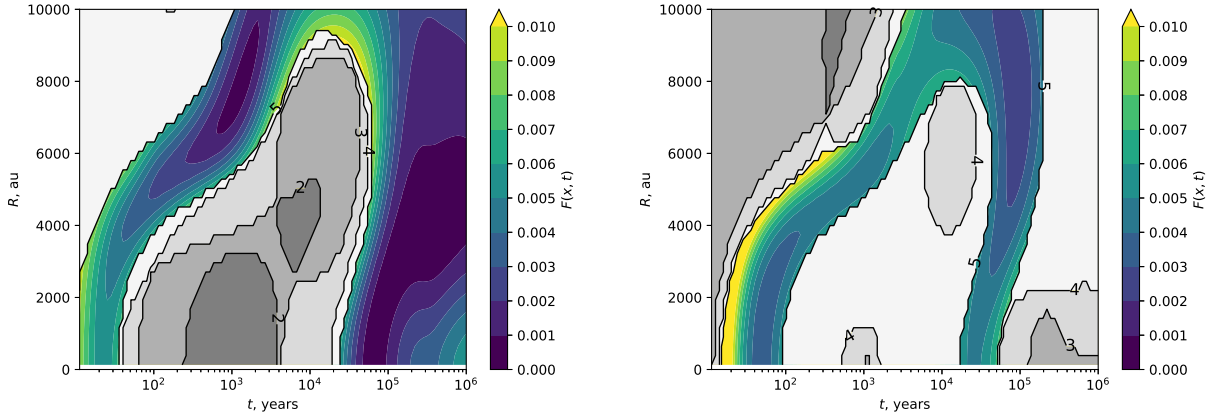


Рис. 2.3. Карты согласия для пылевого пика (слева) и метанольного пика (справа). Чем выше значение $F(t, R)$, тем хуже согласие с наблюдениями; 0.000 означает полное согласие.

держания в согласии с наблюдениями, заполнены градациями серого (чем темнее оттенок, тем меньше компонентов имеют модельные содержания в согласии с наблюдениями). Цвет внутри областей наилучшего согласия отвечает за значения функции $F(t, R)$, которая подобна функции из уравнения (17) в [10]:

$$F(t, R) = \sum_{i=1}^6 \left(\frac{\lg \chi_{\text{obs}}(X_i) - \lg \chi_{\text{mod}}^{(t,R)}(X_i)}{\lg \chi_{\text{obs}}(X_i) + \lg \chi_{\text{mod}}^{(t,R)}(X_i)} \right)^2, \quad (2.8)$$

где $\chi_{\text{obs}}(X_i)$ — наблюдаемое содержание компонента X_i (в направлении на пылевой пик или пик метанола, соответственно), а $\chi_{\text{mod}}^{(t,R)}(X_i)$ — модельное содержание соединения X_i в точке (t, R) , полученная из рассчитанных лучевых концентраций. Модельные содержания, в свою очередь, определяются как $\chi_{\text{mod}}^{(t,R)}(X_i) = N_{\text{mod}}^{(t,R)}(X_i) / N_{\text{mod}}^{(t,R)}(\text{H}_2)$. Здесь $N_{\text{mod}}^{(t,R)}(X_i)$ — смоделированная лучевая концентрация X_i , свёрнутая с функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа с $\text{FWHM} = 26.9''$, а $N_{\text{mod}}^{(t,R)}(\text{H}_2)$ — свёрнутая с полушириной диаграммы направленности лучевая концентрация H_2 .

На карте согласия для пылевого пика (левая панель на рисунке 2.3) минимальное значение функции $F(t, R)$ для модели GRD достигается на

расстоянии 3700 а.е. от центра ядра на момент 3.94×10^5 лет. Эта точка во времени находится на границе временного интервала с допустимой степенью вымораживания СО. Минимальное значение $F(t, R)$ для метанольного пика достигается на 7600 а.е в момент 9.77×10^4 лет, когда уровень вымораживания СО согласуется с наблюдениями гораздо лучше (см. рисунок 2.2). При этом на времени 9.77×10^4 лет все рассматриваемые химические соединения демонстрируют модельные содержания в согласии с наблюдательными данными как в направлении на пылевой пик, так и в направлении на пик метанола. Поэтому в настоящей модели 9.77×10^4 лет выбрано как время наилучшего согласия с наблюдательными данными. Заметим, что этот момент времени близок к моменту наилучшего согласия, полученному в [10], который равен 1.6×10^5 лет.

2.3.2. Результаты для модели с реактивной десорбцией по Гэрроду

Рассмотрим результаты моделирования подробнее. На верхней панели рисунка 2.4 представлены модельные содержания изучаемых газофазных соединений (вверху слева), а также содержания, полученные как отношения свёрнутых лучевых концентраций (вверху справа). В таблице 2.6 приведены модельные содержания на момент наилучшего согласия с наблюдениями и их сравнение с наблюдательными данными. Хотя метанольный пик в модели находится несколько дальше от центра ядра, чем наблюдаемый пик метанола (так же, как и в [10]), согласие модельных результатов с наблюдениями как для наблюдаемого пылевого пика, так и для наблюдаемого метанольного пика (~ 4000 а.е. от пылевого) очень хорошее. В отличие от модели из работы [10], не наблюдается перепроизводства метанола (их модельное пиковое содержание CH_3OH было равно 2.7×10^{-8}). В настоящей модели содержание CH_3OH на 4000 а.е. составляет 1.2×10^{-9} , что даже несколько ниже наблюдаемых значений 8.0×10^{-9} из [18] и 6.0×10^{-9} из [106]. Отметим, что максимальное содержание мета-

Таблица 2.6. Наблюдаемые содержания СОМ в газовой фазе $\chi_{\text{obs}}(\text{X})$ в сравнении с модельными $\chi_{\text{mod}}(\text{X}) = N_{\text{mod}}(\text{X})/N_{\text{mod}}(\text{H}_2)$, полученными как отношения сглаженных лучевых концентраций. Наблюдаемые содержания для CH_3OH взяты из [17], для остальных соединений – из [18].

Компонент	$\chi_{\text{obs}}(\text{X})$	$\chi_{\text{mod}}(\text{X})$
Пылевой пик		
CH_3OH	4.0×10^{-10}	3.1×10^{-10}
CH_3O	$\leq (5.1 - 6.7) \times 10^{-12}$	6.2×10^{-12}
CH_3CHO	2.2×10^{-11}	1.3×10^{-11}
CH_3OCH_3	$(2.8 \pm 0.4) \times 10^{-11}$	6.8×10^{-12}
HCOOCH_3	$(8.1 \pm 7.4) \times 10^{-11}$	6.2×10^{-11}
NH_2CHO	$\leq (2.4 - 3.1) \times 10^{-13}$	1.6×10^{-13}
Пик CH_3OH		
CH_3OH	8.0×10^{-9}	1.2×10^{-9}
CH_3O	2.7×10^{-11}	8.3×10^{-12}
CH_3CHO	2.1×10^{-10}	5.0×10^{-11}
CH_3OCH_3	$(5.1 \pm 1.1) \times 10^{-11}$	3.1×10^{-11}
HCOOCH_3	$(1.5 \pm 0.9) \times 10^{-10}$	2.5×10^{-10}
NH_2CHO	$\leq (6.7 - 8.7) \times 10^{-13}$	5.4×10^{-13}

нола в нашей модели составляет 2.1×10^{-9} на 6800 а.е. от пылевого пика.

Интересно, что отношения содержаний СОМ и метанола в газовой фазе в настоящей модели существенно выше, чем в [10]. На 4000 а.е. модельные содержания таких СОМ, как CH_3OCH_3 , CH_3CHO и HCOOCH_3 , составляют 3%, 4% и 21% от содержания метанола, соответственно. В работе [10] разрыв между модельными содержаниями СОМ и метанола в среднем выше: обилия HCOOCH_3 и CH_3OCH_3 составляют 0.2% и 0.1% модельного содержания метанола, соответственно, а обилие CH_3CHO — 2% от содержания CH_3OH . В [15] приводятся отношения наблюдаемых содержаний СОМ и метанола для дозвёздных ядер в диапазоне от нескольких до $\sim 10\%$ (см. рисунок 12 в упомянутой работе). Интересно, что расстояния от пылевого пика, на которых наблюдаются пики содержаний различных

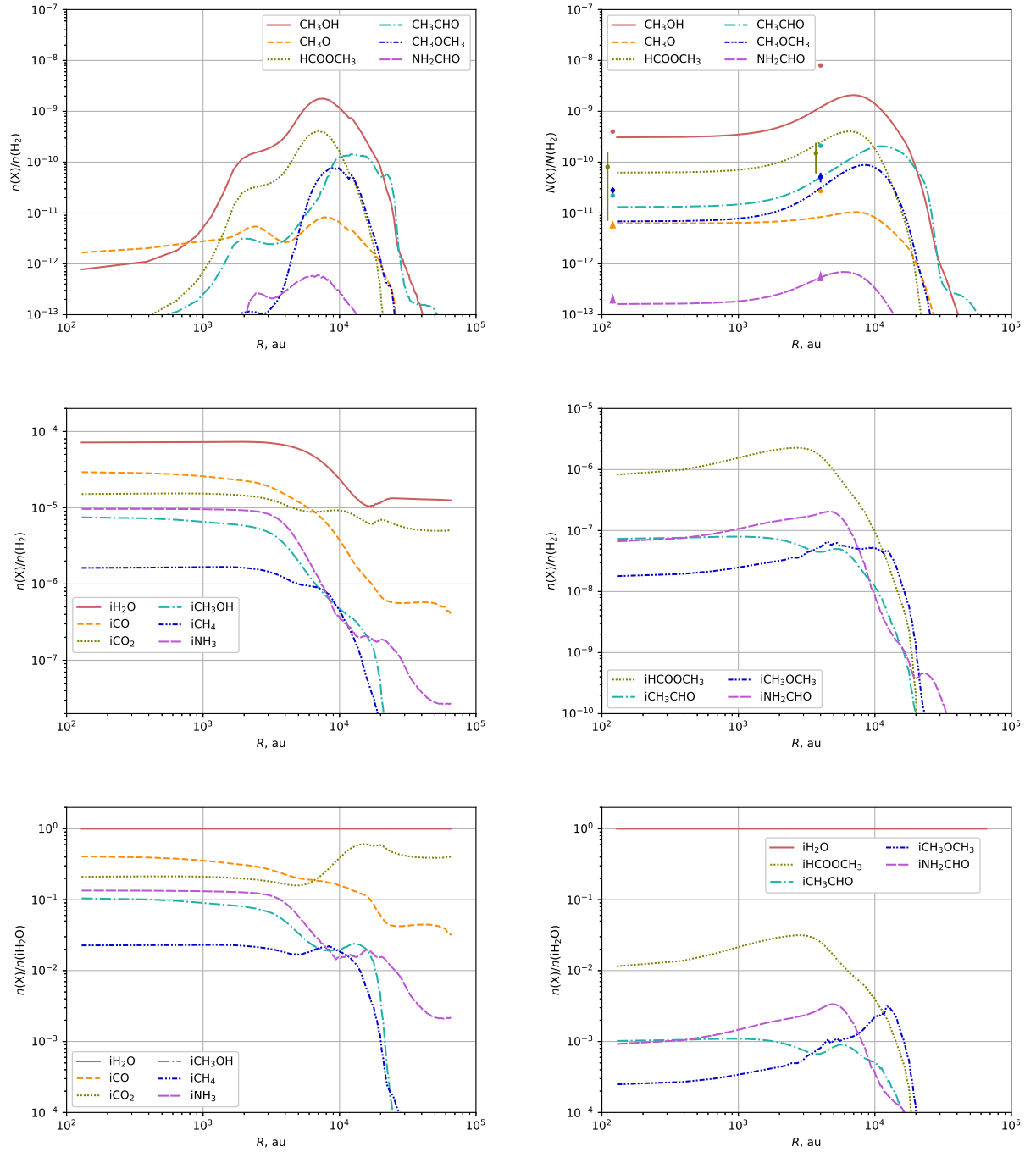


Рис. 2.4. Радиальные профили, полученные в модели GRD на момент наилучшего согласия с наблюдательными данными (9.77×10^4 лет). Вверху: профили модельных содержаний COM (слева) и отношений лучевых концентраций (справа). Лучевые концентрации свёрнуты с функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа с $\text{FWHM} = 26.9''$. В центре: профили содержаний основных компонентов льда (слева) и избранных COM во льду (справа) по отношению к H_2 . Внизу: то же, что и в центре, но по отношению ко льду H_2O . Цветными точками на верхней правой панели отмечены данные, полученные в наблюдениях [17] (CH_3OH) и [18] (остальные химические соединения), стрелками обозначены верхние пределы наблюдаемых содержаний, вертикальными линиями — ошибки наблюдений.

СОМ, варьируются: тогда как пики обилий HCOOCH_3 и NH_2CHO совпадают с метанольным пиком, пики CH_3CHO и CH_3OCH_3 расположены несколько дальше от пылевого пика. Подобное поведение связано с путями формирования СОМ — не все из них прямо связаны с метанолом (см. ниже).

В настоящей модели состав ледяных мантий межзвёздных пылинок для ядра L1544 отличается от состава, полученного в модели из работы [10], и может рассматриваться как лучше соответствующий наблюдениям. На средней панели рисунка 2.4 представлены модельные содержания $n(\text{X})/n(\text{H}_2)$ ключевых компонентов льда (слева) и СОМ во льду (справа); на нижней панели данного рисунка приведены их отношения к содержанию водяного льда. В таблице 2.7 даны обилия избранных молекул в твёрдой фазе, их отношения к содержанию льда H_2O в процентах, а также рассчитанные лучевые концентрации $N(\text{X})$ для удобства последующего сравнения с наблюдениями. Лёд СО обилен в центральных областях ядра, его содержание достигает 40% по отношению к водяному льду. На позиции метанольного пика доля льда СО становится приблизительно в два раза меньше и далее падает по направлению к краю ядра. В отличие от модели из [10], лёд CO_2 также оказывается обилен и достигает содержания в 21% по отношению к водяному льду на позиции пылевого пика и 16% на позиции метанольного пика. Метанол в твёрдой фазе не столь обилен, как в [10]. Его содержание наиболее высоко в центре (около 10% от водяного льда), затем спадает по направлению на край ядра, достигая 5% от содержания водяного льда в направлении на метанольный пик. В настоящей модели содержание метанола (около 10% в направлении на пылевой пик и около 5% — на пик метанола) выше, чем средние обилия в похожих объектах межзвёздной среды (3% от водяного льда для маломассивных протозвёзд, 4% для массивных протозвёзд и ядер облаков согласно [25]). Однако в работе [107] сообщается, что содержание метанольного льда в ядре L1544

составляет 11% и более по отношению к водяному льду, что согласуется с нашими результатами моделирования. Содержание аммиачного льда приблизительно на 30% выше, чем у льда метанола, и следует аналогичному радиальному тренду. Содержание метанового льда приблизительно одинаково на позициях пылевого и метанольного пиков и составляет $\approx 2\%$ от водяного льда.

Ацетальдегид, диметиловый эфир и формамид демонстрируют содержания в диапазоне 10^{-8} – 10^{-7} в направлении на пылевой пик (0.1% или менее по отношению к водяному льду). Метилформиат во льду более обилен. На позиции пылевого пика его содержание составляет 8.3×10^{-7} (1% по отношению к водяному льду), что сравнимо с содержанием льда метана (1.6×10^{-6}). Содержание адсорбированного ацетальдегида показывает некоторый спад в направлении метанольного пика, тогда как три другие СОМ имеют пики по направлению к краю ядра.

В отличие от [10], где содержания всех компонентов льда оказываются ниже 10^{-7} на краю ядра, в настоящей модели на краю ядра толщина льда не становится пренебрежимо малой. В нашей модели одному монослою льда примерно соответствует содержание 2×10^{-6} . На краю ядра вода и двуокись углерода имеют модельные содержания 1.2×10^{-5} и 5.1×10^{-6} соответственно. Разница между моделями в толщине льда, вероятно, обусловлена различиями в первой фазе моделирования: в данной модели используется “полупрозрачное облако” с концентрацией водорода 10^3 см^{-3} и линейно спадающей температурой от 15 К до 10 К, тогда как в модели [10] было выбрано “диффузное облако” с меньшей плотностью газа (10^2 см^{-3}) и постоянной температурой 20 К. Поглощение в оптическом диапазоне в обоих случаях одинаково и составляет 2 mag.

Содержание молекулярного водорода в поверхностных слоях ледяной мантии составляет $\sim 10\%$ от общей концентрации поверхностного вещества в центральных областях ядра и в направлении на край ядра снижается

Таблица 2.7. Модельные содержания наиболее важных компонентов льда и твёрдых СОМ в L1544 ($n(X)$), их отношения к содержанию льда H_2O в процентах ($n(X)/n(iH_2O)$, %) и расчётные лучевые концентрации $N(X)$. Отношение лучевых концентраций не совпадает с отношением обилий, поскольку лучевые концентрации получаются интегрированием вдоль луча зрения, тогда как обилия привязаны к определённой пространственной позиции в ядре. Расчётная лучевая концентрация H_2 составляет $8.5 \cdot 10^{22}$ в направлении на пылевой пик и $7.9 \cdot 10^{21}$ в направлении на пик метанола.

Компонент	$n(X)$	$n(X)/n(iH_2O)$, %	$N(X)$, cm^{-2}
Пылевой пик			
iH_2O	$7.2 \cdot 10^{-5}$	100.00	$1.2 \cdot 10^{19}$
iCO	$2.9 \cdot 10^{-5}$	40.86	$4.5 \cdot 10^{18}$
iCO_2	$1.5 \cdot 10^{-5}$	21.07	$2.5 \cdot 10^{18}$
iCH_4	$1.6 \cdot 10^{-6}$	2.27	$2.7 \cdot 10^{17}$
iNH_3	$9.6 \cdot 10^{-6}$	13.44	$1.6 \cdot 10^{18}$
iCH_3OH	$7.5 \cdot 10^{-6}$	10.43	$1.1 \cdot 10^{18}$
iCH_3CHO	$7.3 \cdot 10^{-8}$	0.10	$1.2 \cdot 10^{16}$
iCH_3OCH_3	$1.8 \cdot 10^{-8}$	0.02	$4.0 \cdot 10^{15}$
$iHCOOCH_3$	$8.3 \cdot 10^{-7}$	1.15	$2.0 \cdot 10^{17}$
iNH_2CHO	$6.6 \cdot 10^{-8}$	0.09	$1.5 \cdot 10^{16}$
Пик CH_3OH			
iH_2O	$6.6 \cdot 10^{-5}$	100.00	$7.5 \cdot 10^{17}$
iCO	$1.5 \cdot 10^{-5}$	22.66	$1.5 \cdot 10^{17}$
iCO_2	$1.1 \cdot 10^{-5}$	16.51	$1.5 \cdot 10^{17}$
iCH_4	$1.2 \cdot 10^{-6}$	1.81	$1.3 \cdot 10^{16}$
iNH_3	$5.9 \cdot 10^{-6}$	8.99	$4.5 \cdot 10^{16}$
iCH_3OH	$3.3 \cdot 10^{-6}$	4.95	$2.7 \cdot 10^{16}$
iCH_3CHO	$4.5 \cdot 10^{-8}$	0.07	$5.4 \cdot 10^{14}$
iCH_3OCH_3	$5.4 \cdot 10^{-8}$	0.08	$8.0 \cdot 10^{14}$
$iHCOOCH_3$	$1.7 \cdot 10^{-6}$	2.53	$1.3 \cdot 10^{16}$
iNH_2CHO	$1.9 \cdot 10^{-7}$	0.29	$2.0 \cdot 10^{15}$

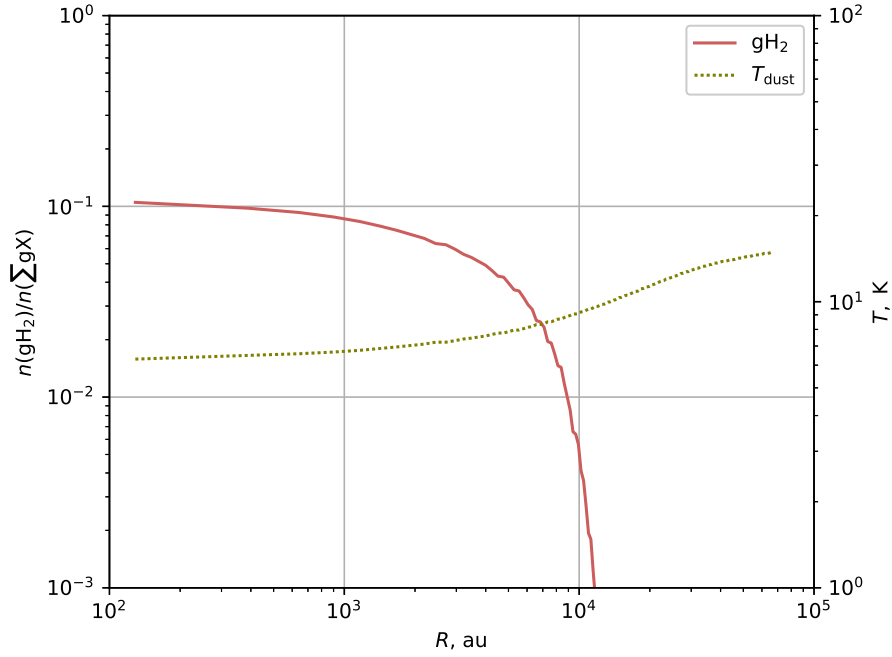


Рис. 2.5. Изменение доли молекулярного водорода во льду вдоль радиуса. Её значение становится равновесным почти мгновенно и не испытывает существенных изменений за время моделирования. Для справки также приведено изменение температуры пыли по радиусу.

(рисунок 2.5). Высокое содержание молекулярного водорода обуславливает существенное изменение энергии десорбции Н и Н₂, что, в свою очередь, влияет как на поверхностную химию, так и на скорость реактивной десорбции. Благодаря высокому содержанию gH₂ реакции с ним могут идти эффективно. Как показано ниже, подобные реакции важны для формирования водяного льда и метана.

2.3.3. Химические процессы на пике метанола в модели с реактивной десорбцией по Гэрроду

В данном разделе обсуждаются химические реакции на позиции метанольного пика, наблюдаемого на расстоянии 4000 а.е. относительно центра ядра. Все значения приводятся на момент наилучшего согласия с наблюдениями для GRD-модели (9.77×10^4 лет).

Важно отметить, что диффузионные реакции на поверхности косми-

ческой пыли, эффективные при $T_{\text{dust}} \sim 10$ К, — такие как гидрирование — так же быстро идут в недиффузионном режиме. Таким образом, недиффузионные механизмы эффективно ускоряют диффузионные реакции при низких температурах. К примеру, поверхностные реакции присоединения Н, в результате которых образуются метанол и другие СОМ, становятся примерно на 20% быстрее благодаря недиффузионным механизмам. Далее перейдём к описанию основных путей формирования изучаемых молекул: CH_3OH , HCOOCH_3 , CH_3CHO , CH_3OCH_3 , NH_2CHO , а также основных компонентов льда: H_2O , CO_2 , CH_4 , NH_3 .

CH_3OH . В настоящей модели метанол в основном формируется на поверхности пыли как результат последовательного гидрирования молекулы СО в диффузионных химических реакциях, представленных в таблице 2.1. Эта цепочка реакций также является главным источником промежуточных радикалов HCO , CH_2OH и CH_3O , играющих ключевую роль в формировании СОМ путём недиффузионных радикал-радикальных реакций (см. ниже). Реакции абстракции водорода, которые в нашей модели включены в цепочку гидрирования СО, увеличивают производство упомянутых радикалов на поверхности пыли. Они также вдвое повышают содержание метанола в газовой фазе по сравнению с тестовой моделью, где абстракция исключена, поскольку многочисленные акты формирования и разрушения CH_3OH в конечном итоге увеличивают вероятность реактивной десорбции для молекул метанола. Это верно и для его прекурсоров. Недиффузионная реакция $\text{gCH}_3\text{O} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH} + \text{gH}_2\text{CO}$ отвечает всего за 4% производства метанола на поверхности пылевых частиц.

Один из интермедиатов в цепочке производства метанола, формальдегид, в нашей модели может также формироваться посредством реакции $\text{gC} + \text{gH}_2\text{O} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$. Однако её роль в производстве твердофазного формальдегида оказалась пренебрежимо мала — за исключением внешних областей ядра. Заметим однако, что в условиях полупрозрачного облака, где

доступно больше атомарного углерода, недиффузионная версия данной реакции действительно эффективна и производит большинство gH_2CO на ранних временах эволюции полупрозрачного облака. В конце фазы полупрозрачного облака содержание льда H_2CO составляет $\sim 10^{-7}$, что примерно на порядок меньше одного монослоя льда.

Газофазные процессы отвечают лишь за 10% производства метанола. Интересно, что среди основных газофазных путей имеется диссоциативная рекомбинация протонированных и ионизованных сложных органических молекул HCOOCH_3 и CH_3OCH_3 .

HCOOCH_3 . Почти весь метилформиат производится на пыли. В газ он поступает благодаря реактивной десорбции. В настоящей модели HCOOCH_3 — продукт поверхностной реакции $\text{gHCO} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gHCOOCH}_3$, которая идёт недиффузионно. Эффективность реактивной десорбции в ней составляет 0.02%. (Снова заметим, что эффективность реактивной десорбции в модели GRD рассчитывается согласно [53], а затем умножается на долю поверхности, не покрытую льдом H_2O , которая составляет 23% на момент $\sim 10^5$ лет; её состав на позиции метанольного пика — 31% gCO и 15% gCO_2). Эффективность реактивной десорбции в упомянутой реакции приблизительно утраивается благодаря петлям присоединения/абстракции водорода $\text{gHCOOCH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OCO} + \text{H}_2$; $\text{gCH}_3\text{OCO} + \text{H} \rightarrow \text{HCOOCH}_3$.

Хотя газофазные пути формирования метилформиата, предложенные в предыдущих работах, также присутствуют и в настоящей работе, их вклад в сравнении с образованием HCOOCH_3 на пыли минимален. Реакция $\text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{O} \rightarrow \text{HCOOCH}_3 + \text{H}$, внедрённая в астрохимическое моделирование [28], обуславливает лишь 0.4% общей продукции HCOOCH_3 в нашей модели. В работе [10] важным путём образования протонированного метилформиата была реакция $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{HCOOH} \rightarrow \text{HC(OH)OCH}_3^+ + \text{H}_2\text{O}$. В настоящей работе вклад данной реакции в образование метилформиата

составляет лишь 0.1%.

CH₃OCH₃. Диметиловый эфир в настоящей модели производится в основном посредством двух каналов. Первый из них — реакция $gCH_3 + gCH_3O \rightarrow gCH_3OCH_3$, которая идёт недиффузионно. Доля реактивной десорбции в ней составляет 0.03%. Однако петля присоединения/абстракции водорода ($gCH_3OCH_3 + gH \rightarrow gCH_3OCH_2 + gH_2$; $gH + gCH_3OCH_2 \rightarrow gCH_3OCH_3$) эффективно увеличивает это значение в ~ 6 раз. Вторым каналом — недиффузионная реакция $gCH_2 + gCH_3O \rightarrow gCH_3OCH_2$ с последующим присоединением атома водорода. Таким образом, второй канал накладывается на упомянутую петлю присоединения/абстракции водорода, производя дополнительное количество радикала gCH_3OCH_2 . Поэтому реакция гидрирования $gH + gCH_3OCH_2 \rightarrow gCH_3OCH_3$ не просто часть петли (как это было в случае метилформиата) — диметиловый эфир в ней действительно образуется. Реактивная десорбция, усиленная благодаря петле присоединения/абстракции водорода, — основной источник диметилового эфира в газе; она отвечает за 99% его продукции в газовой фазе.

Собственно газофазные процессы обеспечивают менее 1% производства диметилового эфира. Наиболее эффективный газофазный путь формирования CH_3OCH_3 — диссоциативная рекомбинация протонированного диметилового эфира, который, в свою очередь, образуется в реакции радиативной ассоциации CH_3OH и иона CH_3^+ и в нейтраль-нейтральной реакции $CH_3O + CH_3 \rightarrow CH_3OCH_3$. Роль этих процессов существенно уменьшилась по сравнению с предыдущими работами. Формирование протонированного диметилового эфира менее эффективно, чем в [10], поскольку концентрация газофазного метанола в настоящей работе существенно ниже в сравнении с [10]. (Протонированный диметиловый эфир производится в реакции $CH_3^+ + CH_3OH \rightarrow (CH_3)_2OH^+$, а также в реакциях самого диметилового эфира с ионами H_3^+ , HSO^+ и H_3O^+ , однако в последнем случае мы получаем петлю). Для реакции $CH_3O + CH_3 \rightarrow CH_3OCH_3$ были взяты константы

скорости, полученные методом “фазового пространства” в детальной работе [102]. Скорость реакции стала на порядок ниже той, которая ранее использовалась в [28] и [10], поэтому роль этой реакции в образовании диметилового эфира соответственно сократилась.

CH₃CHO. В газовую фазу ацетальдегид также большей частью поставляется благодаря реактивной десорбции в поверхностных процессах. Наиболее продуктивна реакция $gCH_3 + gHCO \rightarrow gCH_3CHO$, которая идёт недиффузионно. Доля реактивной десорбции в ней составляет 0.1%. Петля присоединения/абстракции водорода ($gH + gCH_3CO \rightarrow gCH_3CHO$ и $gH + gCH_3CHO \rightarrow gH_2 + gCH_3CO$) на порядок усиливает перенос ацетальдегида с поверхности пыли в газ. Другой путь производства gCH_3CO и последующего формирования gCH_3CHO (приблизительно 25% от общей продукции поверхностного ацетальдегида) — это цепочка $gCO \rightarrow gCCO \rightarrow gHC_2O \rightarrow gCH_2CO \rightarrow gCH_3CO \rightarrow gCH_3CHO$, предложенная в [89] (а также аналогичная цепочка реакций в толще мантии). Реакции присоединения H проходят диффузионно, ускоряясь благодаря аналогичным недиффузионным процессам. Доля реактивной десорбции для CH_3CHO , образуемого в конечной реакции данной цепочки, тоже составляет 0.1%. CCO производится в недиффузионной реакции $gC + gCO \rightarrow gCCO$. В толще мантии пыли недиффузионная реакция $bO + bC_2 \rightarrow bCCO$ также эффективна, хотя её скорость в 4 раза ниже, чем скорость реакции $bC + bCO \rightarrow bCCO$. На позиции метанольного пика bCH_2CO эффективно производится посредством фотодиссоциации этанолового льда фотонами, индуцированными космическими лучами.

В нашей модели 98% газофазного ацетальдегида получается благодаря реактивной десорбции в двух упомянутых выше реакциях производства CH_3CHO на пыли. Собственно газофазные процессы отвечают лишь за 2% продукции ацетальдегида в газе. Наиболее быстрая из них — диссоциативная рекомбинация протонированного ацетальдегида $(CH_3CHO)H^+$,

который формируется в реакции $\text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow (\text{CH}_3\text{CHO})\text{H}^+$. Реакция $\text{O} + \text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO} + \text{H}$, в которой также производится ацетальдегид, идёт приблизительно в 10 раз медленнее, чем диссоциативная рекомбинация $(\text{CH}_3\text{CHO})\text{H}^+$.

NH_2CHO . Газофазный путь образования формамида, имеющийся в базе химических реакций OSU [108, 109], как было показано позже, неэффективен [93, 110]. С другой стороны, эффективность производства формамида на пыли посредством реакции $\text{gNH}_2 + \text{gHCO} \rightarrow \text{gNH}_2\text{CHO}$ недавно была подтверждена экспериментально [111]. В настоящей модели эта поверхностная реакция является единственным источником формамида как в газе, так и на пыли. При низких температурах она идёт недиффузионно. Доля реактивной десорбции в ней составляет 0.02%.

Среди рассмотренных СОМ в настоящей модели наиболее обильным во льду оказался метилформиат. Почему это так? Суммарная скорость недиффузионной реакции $\text{gHCO} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gHCOOCH}_3$ и её аналога в толще мантии, которые производят подавляющую долю льда HCOOCH_3 , в 9 раз выше, чем общая скорость недиффузионной реакции $\text{gCH}_3 + \text{gHCO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CHO}$ и её аналога в толще мантии (производящих лёд CH_3CHO) и в 20 раз выше общей скорости недиффузионной реакции $\text{gCH}_3 + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OCH}_3$ и её аналога в толще мантии (формирующих лёд CH_3OCH_3). Хотя все эти реакции не имеют барьера активации, содержания их реагентов существенно различаются: 2.5×10^{-7} у gHCO (4.8×10^{-6} у bHCO), 7.9×10^{-8} у gCH_3O (2.2×10^{-6} у bCH_3O), и всего лишь 1.0×10^{-14} у gCH_3 (7.7×10^{-7} у bCH_3) на момент времени $\sim 10^5$ лет. Как было упомянуто ранее, радикалы HCO и CH_3O эффективно производятся в цепочке образования метанола. Лёд CH_3 в основном образуется путём фотодиссоциации метанольного льда фотонами, индуцированными космическими лучами, путём фотодиссоциации льда CH_3O и в диффузионной реакции $\text{gH}_2 + \text{gCH}_2 \rightarrow \text{gCH}_3 + \text{gH}$. При этом скорости производства

CH_3 в твёрдой фазе значительно ниже, чем у радикалов HCO и CH_3O .

Химия основных компонентов льда. В настоящей модели включена адсорбция H_2 , что обуславливает его значительное количество на пыли. Поэтому неудивительно, что химические реакции с участием H_2 играют важную роль в формировании некоторых составляющих льда. Наиболее обильный компонент — это водяной лёд, и основным путём формирования gH_2O является диффузионная реакция $\text{gH}_2 + \text{gOH} \rightarrow \text{gH}_2\text{O} + \text{gH}$, которая отвечает за 84% обилия воды на поверхности пыли в направлении наблюдаемого газофазного пика метанола. Недиффузионные реакции поверхностного гидроксила с gH_2CO , gHCO , gCH_3O и gCH_2OH обуславливают 15% производства gH_2O . Что касается льда CO , как и во многих подобных моделях, монооксид углерода преимущественно вымораживается на пыль из газа.

Лёд CO_2 в нашей модели производится исключительно благодаря недиффузионным процессам. Основным источником gCO_2 — недиффузионная реакция $\text{gOH} + \text{gCO} \rightarrow \text{gCO}_2 + \text{gH}$ (89% от общей его продукции). Этот канал остаётся важным даже на больших радиусах, и, несмотря на фотодиссоциацию, двуокись углерода сохраняет ненулевую концентрацию на краю ядра. Другой канал — недиффузионная реакция $\text{gO} + \text{gHCO} \rightarrow \text{gCO}_2 + \text{gH}$ (10%). Аналоги упомянутых реакций в толще ледяной мантии имеют скорости приблизительно в 5 раз ниже, чем реакции в поверхностных слоях.

Источником gNH_3 оказывается диффузионная реакция $\text{gH}_2 + \text{gNH}_2 \rightarrow \text{gNH}_3 + \text{gH}$ (99% его продукции). Аналогичные реакции в толще мантии (как диффузионная, так и недиффузионная) идут приблизительно в 5 раз медленнее.

Более половины от общего обилия метана (65%) поставляется на поверхность пыли путём вымораживания из газа, где он формируется посредством ион-молекулярных реакций. Основным источником образования gCH_4 на поверхности пыли — диффузионная реакция $\text{gH}_2 + \text{gCH}_3 \rightarrow \text{gCH}_4 + \text{gH}$

(34% от общей продукции gCH_4). Диффузионные и недиффузионные реакции $\text{bH} + \text{bCH}_3 \rightarrow \text{bCH}_4$ в толще мантии суммарно обладают скоростью, близкой к скорости вышеупомянутой поверхностной реакции.

2.3.4. Сравнение с моделью, использующей реактивную десорбцию по Миниссале

В предыдущем разделе были представлены результаты модели GRD, в которой применяется параметризация реактивной десорбции, основанная на RRKM-теории и подробно описанная, например, в [53]. С другой стороны, в работе [10], где наблюдаемые концентрации COM, а также положение метанольного пика в ядре L1544 воспроизведены успешно, РД была параметризована иначе. А именно, они использовали параметризацию, основанную на лабораторных экспериментах [50]. При этом в общем случае две упомянутые параметризации могут давать существенно различные эффективности РД для одних и тех же реакций. Поскольку доля РД для многих реакций имеет большую неопределённость, интересно выяснить, как газофазные концентрации COM и состав льда в настоящей модели зависят от выбранной параметризации РД. С этой целью была сконструирована модель, аналогичная описанной выше модели GRD, но с параметризацией РД согласно [112]. Ниже она называется моделью MRD.

Модель MRD была запущена с теми же параметрами, как и вышеописанная модель GRD. Также в обеих моделях исследовались различные значения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ для атомарных и молекулярных соединений (см. раздел 2.3.5). В модели MRD согласия с наблюдениями одновременно для всех изучаемых соединений не было достигнуто. Поэтому для сравнения с моделью GRD выбраны те же $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$, какие использовались в модели GRD. Результаты сравнивались на момент наилучшего согласия модели GRD с наблюдательными данными, 9.77×10^5 лет.

Результаты для модели MRD представлены на рисунке 2.6. Содер-

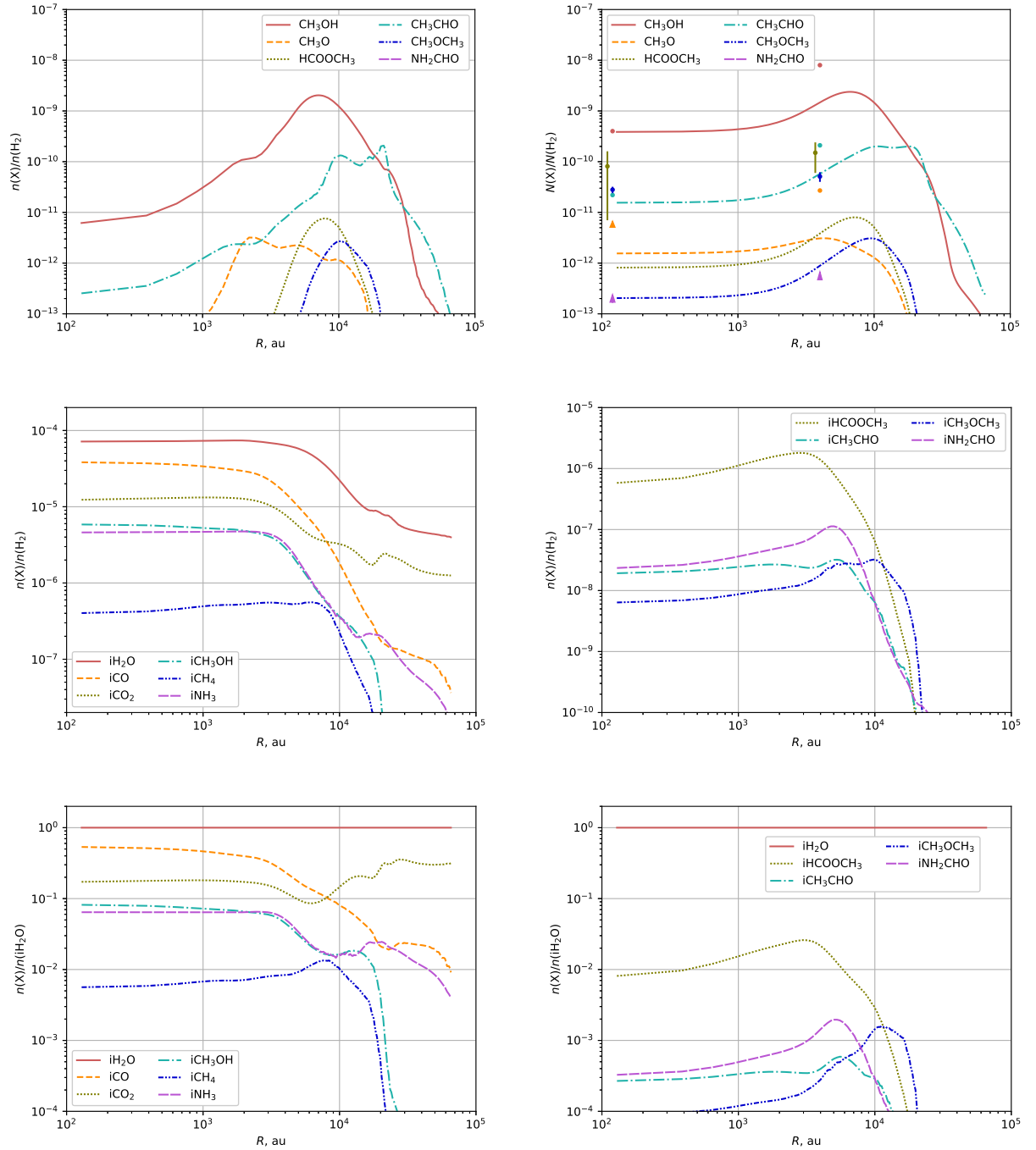


Рис. 2.6. Радиальные профили, полученные в модели MRD на момент 9.77×10^4 лет. Вверху: профили модельных содержаний COM (слева) и отношений лучевых концентраций (справа). Лучевые концентрации свёрнуты с функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа с $\text{FWHM} = 26.9''$. В центре: профили содержаний основных составляющих льда (слева) и избранных COM во льду (справа) по отношению к H_2 . Внизу: то же, что и в центре, но по отношению ко льду H_2O . Цветными точками на верхней правой панели отмечены данные, полученные в наблюдениях [17] (CH_3OH) и [18] (остальные химические соединения), стрелками обозначены верхние пределы наблюдаемых содержаний, вертикальными линиями — ошибки наблюдений.

жания метилформиата и диметилового эфира оказались ниже наблюдаемых на один-два порядка величины (верхняя панель рисунка 2.6). Доля реактивной десорбции, рассчитанная согласно [112] для реакций $g\text{CH}_3 + g\text{CH}_3\text{O} \rightarrow g\text{CH}_3\text{OCH}_3$ и $g\text{HCO} + g\text{CH}_3\text{O} \rightarrow g\text{HCOOCH}_3$, очень низка – порядка 10^{-7} и 10^{-14} соответственно. Реакции присоединения водорода, в которых производятся эти СОМ, демонстрируют эффективность реактивной десорбции такого же порядка. Таким образом, в случае MRD поверхностные процессы не могут доставить в газ количества HCOOCH_3 и CH_3OCH_3 , достаточные для достижения согласия с наблюдениями. Интересно при этом, что содержания ацетальдегида (CH_3CHO) в моделях GRD и MRD схожи, поскольку эффективность РД для формирования его на поверхности пыли в обеих моделях близка. Что касается формамида, доля РД в реакции $g\text{NH}_2 + g\text{HCO} \rightarrow g\text{NH}_2\text{CHO}$ выше в 4 раза для модели GRD, чем для модели MRD. Таким образом, при отсутствии эффективных газофазных путей образования, концентрация формамида в газе оказывается пренебрежимо мала в модели MRD.

В отличие от газовой фазы, композиция льда не испытывает драматических изменений при замене параметризации реактивной десорбции. В центральных областях ядра изменения обилий всех исследуемых соединений во льду не превосходят порядка величины по сравнению с результатами модели GRD (рисунок 2.6, средняя и нижняя панели). Наиболее значимые различия касаются льдов NH_3 , CH_4 , CH_3CHO , CH_3OCH_3 и NH_2CHO , содержания которых снижаются приблизительно на 0.5 порядка величины по сравнению с моделью GRD. В частности, для $g\text{NH}_2$ реактивная десорбция в реакции его формирования $g\text{H} + g\text{NH} \rightarrow g\text{NH}_2$ приблизительно в 20 раз эффективнее в модели MRD, чем в модели GRD. При этом $g\text{NH}_2$ является прекурсором как для $g\text{NH}_3$, так и для $g\text{NH}_2\text{CHO}$. Таким образом, в модели MRD большая доля $g\text{NH}_2$ уходит в газ благодаря РД, что обуславливает меньшие содержания аммиака и формамида

во льду. Прекурсор gCH_4 , CH_3OCH_3 и $\text{gCH}_3\text{CHO} \rightarrow \text{gCH}_3$ — производится более эффективно в модели GRD. Основной путь его образования — это реакция $\text{gH}_2 + \text{gCH}_2 \rightarrow \text{gCH}_3 + \text{gH}$, а содержание gCH_2 в случае модели GRD выше, поскольку реактивная десорбция в реакции его формирования $\text{gH}_2 + \text{gC} \rightarrow \text{gCH}_2$ приблизительно в 40 раз слабее в модели GRD, чем в модели MRD. Таким образом, несмотря на малость доли реактивной десорбции в сравнении со скоростями самих поверхностных реакций, её изменения могут умеренно влиять в том числе и на состав льда.

2.3.5. Варьирование отношения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$

Соотношение между энергией диффузии и энергией десорбции всё ещё является предметом дискуссий и может различаться для разных соединений (см., например, [47]). Более того, вероятно, имеет место распределение энергий диффузии и десорбции в зависимости от сайтов связывания на поверхности (например, [57]; подобное распределение в настоящую модель не внедрено). Чтобы исследовать, насколько хорошо симуляции с различными $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ воспроизводят наблюдательные данные, было запущено два набора моделей, MRD и GRD, в которых отношение $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ варьируется в интервале 0.30–0.60 с шагом 0.05. Туннелирование для диффузии при этом было выключено. Для молекулярных и атомарных соединений $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ варьировались отдельно. Среди моделей MRD не нашлось комбинаций $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$, для которых воспроизводились бы наблюдательные данные. Результаты моделирования для GRD суммированы на рисунке 2.7. Здесь каждая ячейка соответствует определённой паре значений $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ для атомарных частиц и молекулярных соединений. Ячейка закрашена зелёным, если недиффузионная модель с указанным $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ воспроизводит наблюдения СОМ в газовой фазе. Синий цвет означает, что модель не воспроизводит наблюдательные данные. Дополнительно жёлтым цветом обозначены пары $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$, где не только недиффузионная, но и диф-

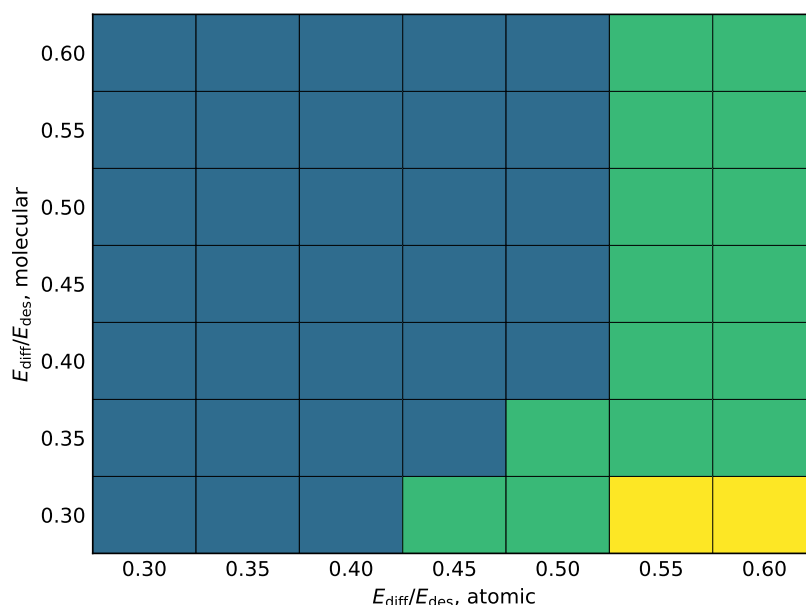


Рис. 2.7. Воспроизведение моделями с разными $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ наблюдательных данных по газофазным СОМ в дозвёздном ядре L1544. Синий: модель не воспроизводит наблюдения; зелёный: недиффузионная модель GRD воспроизводит наблюдения; жёлтый: и недиффузионная, и диффузионная (с выключенными недиффузионными реакциями) модели воспроизводят наблюдения.

фузионная (т.е. с выключенными недиффузионными реакциями) модель GRD воспроизводит наблюдаемые газофазные содержания СОМ. Считается, что модель воспроизводит наблюдения, если существует такой момент времени t , для которого степень вымораживания СО находится в пределах фактора 2 по отношению к наблюдаемому значению, а также модельные газофазные концентрации всех шести изучаемых соединений находятся в согласии с наблюдениями как для пылевого пика, так и для метанольного.

Как видно из рисунка 2.7, значение $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ для атомарных частиц в общем имеет большее влияние на содержания химических соединений, чем значение $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ для молекул. С ростом атомарного $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ улучшается воспроизводимость наблюдательных данных. Для атомарных $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ в диапазоне 0.55–0.60 модель воспроизводит наблюдательные данные при любом молекулярном $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$. Однако релевантность столь

высоких $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ ограничивается составом льда. В нашей основной модели, где $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ равно 0.5 для атомарных частиц и 0.3 для молекулярных соединений, содержание свободных атомов водорода в толще ледяной мантии составляет 1.0×10^{-7} для центра ядра, тогда как увеличение атомарного $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ лишь на 0.05 приводит к росту содержания Н в толще мантии до 2.4×10^{-6} . Для диффузионных моделей ситуация аналогична. Таким образом, атомарное $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.5$ может считаться более физичным по сравнению с более высокими значениями.

В случае $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.5$ для атомов состав льда (как основных его компонентов, так и сложной органики) остаётся практически одинаковым при варьировании молекулярного $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$. В центральных областях ядра вариации содержаний на момент 9.77×10^4 лет не превосходят одной десятой порядка. Однако для молекулярных $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} \geq 0.4$ модельные газофазные содержания для пылевого пика согласуются с наблюдательными лишь в узком интервале времени $\sim 2.0 \times 10^4 - 4.0 \times 10^4$ лет, где газофазное содержание СО всё ещё выше, чем 2.0×10^{-5} , и потому наблюдаемая степень вымораживания СО не достигнута. Таким образом, эти модели приходится отбросить, и в нашей основной модели принято $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.3$ для молекулярных соединений.

2.4. Обсуждение

В настоящей работе одновременно воспроизведены содержания сложных органических соединений, наблюдаемые в дозвёздном ядре L1544, а также положение пика концентрации метанола по отношению к пылевому пику. Более того, состав льда в данной модели выглядит более разумным, чем в предшествующих работах (например, [10]): доля метанольного льда близка к наблюдаемым значениям, полученным в [107], а доля льда CO_2 схожа с данными, которые получены космическим телескопом JWST для других холодных облаков [26]. Интересно также, что модельные содержа-

ния СОМ во льду схожи с содержаниями СОМ в газовой фазе горячих ядер/ядрышек (см., например, [113]).

2.4.1. Сравнение с предшествующей моделью и значение туннелирования сквозь барьеры диффузии

Поскольку в [10] моделирование также проводилось кодом MONACO, а реактивная десорбция задавалась аналогично нашей модели MRD, заманчиво было бы сравнить результаты, полученные в модели MRD, с результатами работы [10]. В частности, интересно понять, почему модель MRD не воспроизводит наблюдаемые содержания СОМ в газовой фазе для ядра L1544 — ведь трактовка РД в обоих случаях одинакова. Пусть реактивная десорбция для недиффузионного формирования СОМ на пыли пренебрежимо мала в модели MRD, можно было бы предположить, что сработает газофазный синтез СОМ, предложенный в [10]. Однако по сравнению с моделью [10] в астрохимический код были внесены значимые изменения. Кроме добавления недиффузионной химии, сама сетка химических реакций была существенно обновлена. Эти обновления в значительной мере объясняют, почему модель MRD не воспроизводит наблюдаемые концентрации СОМ в L1544.

В основной модели, представленной в [10], газофазная химия метанола играет ключевую роль в образовании формальдегида и диметилового эфира. Содержание метанола на пике составляет 2.7×10^{-8} . В нашей же модели MRD газофазное содержание метанола равно 2×10^{-9} . Этим объясняется эффективность газофазной химии в формировании кислородсодержащих соединений в [10]. Пониженное содержание газофазного метанола в модели MRD по сравнению с [10] вызвано несколькими различиями в моделях. Во-первых, ширины барьеров активации для твердофазных реакций $\text{H} + \text{CO} \rightarrow \text{HCO}$ и $\text{H} + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH}/\text{CH}_3\text{O}$ в нашей модели больше, чем в упомянутой работе: $1.35 \text{ \AA}$ (см. таблицу 2.1) против $1.2 \text{ \AA}$ в [10]. Это

обуславливает более медленное гидрирование CO до CH₃OH на поверхности пыли, таким образом уменьшая скорость доставки метанола в газ через реактивную десорбцию. Во-вторых, в настоящей модели внедрены реакции абстракции на промежуточных шагах гидрирования CO, что также уменьшает эффективность образования метанола на поверхности пыли и скорость его попадания в газовую фазу. Важно, что включение туннелирования H и H₂ сквозь барьеры диффузии не помогает улучшить согласие между результатами модели MRD и наблюдательными данными. Далее, как упомянуто выше, в данной работе используются последние оценки скорости для ключевой газофазной реакции $\text{CH}_3 + \text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_3 + h\nu$, предложенные в [102]. Её скорость оказалась на порядок ниже, чем в [10]. Вследствие вышеперечисленных факторов модель MRD оказывается неспособной объяснить газофазные содержания СОМ в L1544, в отличие от модели, представленной в [10].

Наконец, отметим также, что содержание твердофазного метанола в [10] достигает 40% по отношению к водяному льду, тогда как в настоящей работе его содержание приблизительно вчетверо ниже. Перепроизводство метанольного льда в [10] частично объясняется недостаточной эффективностью механизмов образования твёрдого CO₂. Поверхностные реакции $\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$ и $\text{CO} + \text{O} \rightarrow \text{CO}_2$ неэффективны при температуре пыли ≤ 10 K в [10], поскольку в их модели отсутствуют недиффузионные механизмы, а отношение энергии диффузии молекул к энергии десорбции довольно высоко и составляет 0.5.

2.4.2. Некоторые значимые реакции

Хотя в настоящей работе используются скорости поверхностных реакций из цепочки гидрирования CO, предложенные в [29] (см. таблицу 2.1), в литературе есть и другие оценки скоростей, а также вероятностей различных каналов для некоторых из этих крайне важных реак-

ций. В сетке гидрирования CO, предложенной в [114], вероятности каналов $\text{H} + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH}$ и $\text{H} + \text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}_2$ крайне малы (7.27×10^{-5} и $< 5.00 \times 10^{-2}$, соответственно). Упомянутая сетка основывается на квантово-химических расчётах. Будучи безбарьерной, абстракция водорода из твердофазного CH_2OH оказывает значительное влияние на модельное содержание метанольного льда. При её отключении обилие льда CH_3OH растёт на несколько десятых долей порядка и становится равным содержанию адсорбированного CO_2 в центральных частях ядра. Твердофазные метанол и диоксид углерода, таким образом, будут составлять около 19% от водяного льда. Метанольный лёд также оказывается более обилен, чем аммиачный, содержание которого не меняется при выключении упомянутых реакций. Однако стоит отметить, что результаты [114] относятся к поверхности, состоящей из CO, тогда как реальные поверхности межзвёздных пылинок преимущественно состоят из водяного льда. Поэтому в условиях дозвёздных ядер можно ожидать несколько большего содержания льда метанола, чем в нашей модели, но всё ещё не столь высокого, как у льда CO_2 . Содержания газофазных и ледяных СОМ в случае выключения упомянутых реакций будут отличаться не более чем на несколько десятых порядка величины по сравнению с основной моделью, и время наилучшего согласия с наблюдениями не изменится.

Применив квантово-механическую/молекулярно-механическую модель, авторы [115] вывели новые скорости для каналов реакции $\text{H} + \text{H}_2\text{CO}$ в газовой фазе и на поверхности пыли. Однако есть свидетельства, что предложенные ими скорости могут быть завышены. В частности, в работе [114] использовались скорости из [115] для газофазных условий — поскольку исследовались реакции на поверхности из монооксида углерода, ожидалось меньшие скорости, чем предложенные в [115] для водяного льда. Концентрации льдов CH_3OH и H_2CO при этом оказались слишком низкими. Поэтому авторы [114] утверждают, что, вероятно, в [115] недо-

оценены барьеры реакций, отчего их скорости могут быть переоценены. Выражение (2) из [115], предложенное для расчёта температурозависимого коэффициента скорости реакции $k(T)$, даёт скорость поверхностной реакции $\text{H} + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{CH}_3\text{O}$ для диффузионного механизма Лэнгмюра–Хиншельвуда порядка $5 \times 10^5 \text{ с}^{-1}$, тогда как в нашей модели скорость данной реакции составляет порядка 10 с^{-1} .

Включение газофазной реакции $\text{CH} + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO} + \text{H}$ [90], которая играла важную роль в модели [10], приводит к худшему согласию с наблюдениями. В центре ядра содержание газофазного CH_3CHO становится приблизительно на 0.7 порядка величины выше наблюдаемой. На метанольном пике модельное содержание CH_3CHO оказывается на 0.1 порядка выше наблюдаемого, а обилие CH_3OH — более чем на порядок величины ниже в сравнении с наблюдениями. Однако стоит заметить, что без включения данной реакции модельное содержание ацетальдегида оказывается чуть ниже наблюдаемого. Если реакция будет изучена в условиях, аналогичных условиям межзвёздной среды, её внедрение в модель с корректными константами скорости, возможно, поможет достичь лучшего согласия с наблюдаемым содержанием CH_3CHO .

2.4.3. Распыление космическими лучами

Согласно результатам настоящей работы, для получения газофазных концентраций COM в ядре L1544, близких к наблюдаемым, необходимо использовать трактовку реактивной десорбции, в которой доля десорбирующего вещества при формировании COM на поверхности пыли составляет $\sim 0.1\%$. Эта трактовка основана на RRKM-теории и предложена в [116]. Однако есть и другие виды нетепловой десорбции, которые могли бы оказаться эффективны для получения сложных органических молекул в газе. В недавних экспериментальных работах [117–119] были предложены выходы распыления (sputtering) космическими лучами для некоторых основных

компонентов льда, включая H_2O , CO , CO_2 и CH_3OH . Аналогично подходу, предложенному в [120], мы внедрили в модель распыление космическими лучами в качестве одного из видов десорбции. Скорость распыления рассчитывалась с учётом долей льдов CO и CO_2 в поверхностных и глубинных слоях ледяных мантий, а для остального вещества мантий применялись параметры для водяного льда.

В нашей модели единственным значимым эффектом распыления оказалось увеличение содержания газофазных СОМ в центральных областях дозвёздного ядра на несколько десятых порядка (CH_3OH : с 7.8×10^{-13} до 3.4×10^{-12} , HCOOCH_3 : с 5.0×10^{-14} до 2.4×10^{-13} , CH_3CHO : с 6.2×10^{-14} до 1.9×10^{-13} , CH_3OCH_3 : с 2.8×10^{-16} до 1.6×10^{-15} , NH_2CHO : с 1.9×10^{-18} до 3.6×10^{-16}). Однако это не повлияло на отношение лучевых концентраций $N(\text{X})/N(\text{H}_2)$, которое используется для сравнения с наблюдениями. Полученный результат частично находится в согласии с выводом из работы [120]: они предположили, что при высоких плотностях газа распыление космическими лучами — доминирующий вид десорбции для сформировавшихся на пыли молекул, таких как CH_3OH и CH_3OCH_3 . Тем не менее, в нашей модели этот эффект становится заметным лишь при плотностях газа выше $\sim 3 \times 10^5$, тогда как в [120] приводят значение плотности газа 4×10^4 . Следует отметить, что наша модель и модель из [120] существенно различаются: так, их модель содержит химию Ван-дер-Ваальсовых комплексов [20] и не включает в себя недиффузионную химию. Содержания СОМ во льду и его основных составляющих не претерпевают изменений при внедрении распыления космическими лучами в нашу модель.

2.5. Заключение по Главе 2

В данной главе представлено астрохимическое моделирование образования и эволюции сложных органических молекул и ледяных мантий межзвёздных пылинок в дозвёздном ядре L1544. С этой целью использовалась

обновлённая версия кода MONACO, который сейчас включает в себя базовую трактовку недиффузионных механизмов на пыли, а также некоторые обновления газофазных и поверхностных химических процессов. Наиболее значимые результаты можно суммировать следующим образом.

- Обновлённая модель MONACO, включающая в себя недиффузионные химические процессы в ледяных мантиях и новые пути формирования СОМ и других компонентов льда, показывает очень хорошее согласие с наблюдательными данными по газофазным СОМ в дозвёздном ядре L1544. Она также предлагает разумный состав ледяных мантий пылинок, согласующийся с наблюдениями для L1544 и других подобных межзвёздных объектов. Впервые успешно воспроизведены содержания газофазных СОМ и положение метанольного пика в L1544 моделью, включающей в себя недиффузионную химию.
- Механизм недиффузионной химии радикалов, предложенный в [30] и внедрённый в код MONACO согласно [29], эффективен для производства сложных органических молекул в ледяных мантиях холодных ($T_{\text{dust}} < 10$ K) межзвёздных пылинок с содержаниями 0.1–3% по отношению к водяному льду. Важно, что содержания СОМ во льду подобны газофазным содержаниям этих же соединений в горячих ядрах/ядрышках. Таким образом, есть вероятность, что наблюдаемые в газе горячих ядер СОМ сформировались ранее фазы нагрева на переходе от холодных дозвёздных ядер к горячим ядрам/ядрышкам.
- Показано, что параметризация эффективности реактивной десорбции, используемая в модели, критически влияет на концентрации СОМ в газовой фазе и умеренно влияет на концентрации СОМ во льду и его основных компонентов. Таким образом, формирование СОМ во льду и их доставка в холодный газ дозвёздных ядер — это две отдельные проблемы. Как показано в данной работе, эффектив-

ность реактивной десорбции для доставки необходимого количества СОМ в газ должна составлять $\sim 0.1\%$. В нашей модели такой уровень десорбции для сложных молекул достигается только при расчёте скорости реактивной десорбции согласно RRKM-теории. Ни распыление космическими лучами, предложенное в [120], ни реактивная десорбция по Миниссале [50] не оказали нужного эффекта на содержание газофазных СОМ.

2.6. Положения, выносимые на защиту по результатам второй главы

- Впервые успешно воспроизведены содержания газофазных сложных органических соединений (CH_3OH , CH_3CHO , CH_3OCH_3 , HCOOCH_3 , NH_2CHO), а также положение пика концентрации метанола в дозвёздном ядре L1544 моделью, включающей в себя недиффузионные химические процессы в ледяных мантиях пылинок. Показано, что сложные органические молекулы могут образовываться в поверхностных реакциях и доставляться в газовую фазу посредством реактивной десорбции с эффективностью $\sim 0.1\%$.
- Показано, что содержания твердофазных сложных органических соединений в дозвёздном ядре L1544 составляют 0.1–3% по отношению ко льду H_2O , что согласуется с наблюдательными данными по этим соединениям в газовой фазе горячих ядер и ядрышек. Выявлено отношение барьера диффузии частиц на поверхности пыли к их энергии десорбции, при котором достигается наилучшее согласие с наблюдательными данными и наиболее физичная композиция льда.

Заключение

В настоящей работе применялось численное моделирование химического состава в условиях, характерных для дозвёздных ядер и протопланетных дисков, чтобы получить представление о процессах, обуславливающих наблюдаемые содержания химических соединений в данных объектах межзвёздной среды.

Внедрение многослойной структуры мантий космических пылинок позволило получить близкий к наблюдаемому состав ледяных мантий для молекулярного облака, а также выявить большее по сравнению с двухфазной моделью число потенциальных индикаторов вспышки светимости у молодых солнцеподобных звёзд.

Добавление недиффузионных химических процессов во льду пылевых мантий позволило промоделировать химический состав в дозвёздном ядре L1544 с хорошим соответствием имеющимся наблюдательным данным. Было обнаружено, что радикал-радикальные реакции эффективны в образовании сложной органики на пыли, а петли присоединения/абстракции водорода увеличивают поступление молекул в газ посредством реактивной десорбции. Детальное исследование различных типов реактивной десорбции позволило выявить долю продуктов поверхностных реакций, в которых формируются сложные органические молекулы, необходимую для воспроизведения их обилий в газе. Рассмотрение широкого диапазона $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ позволило выяснить наиболее оптимальное отношение этих параметров.

Разработанные в диссертации методы могут применяться и в дальнейшем для моделирования химического состава объектов межзвёздной среды. В частности, можно проследить гравитационный коллапс дозвёздного яд-

ра и определить влияние этого процесса на химический состав газовой и твёрдой фазы. Интересно было бы промоделировать химические процессы в различных областях протопланетного диска с включением трёхфазной химии и недиффузионных реакций во льду. В настоящей работе рассматриваются пылевые частицы одинакового размера, поэтому один из возможных вариантов развития модели — внедрение нескольких населений пыли. Недиффузионные химические процессы можно задать не только в модели, решающей уравнения химической кинетики, но и в кинетической модели Монте-Карло, что позволит аккуратнее проследить химические реакции в ледяных мантиях пылевых частиц.

Литература

1. *Audard et al. (2014)* Episodic Accretion in Young Stars // *Protostars and Planets VI* — 2014. — Pp. 387-410.
2. *Frimann et al. (2017)* Protostellar accretion traced with chemistry. High-resolution C¹⁸O and continuum observations towards deeply embedded protostars in Perseus // *Astron. and Astrophys* — 2017. — V. 602. — Pp. A120.
3. *Jørgensen, Belloche, & Garrod (2020)* Astrochemistry During the Formation of Stars // *An. Rev. Astron. Astrophys* — 2020. — V. 58. — Pp. 727-778.
4. *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.
5. *Wiebe et al. (2019)* Luminosity outburst chemistry in protoplanetary discs: going beyond standard tracers // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2019. — V. 485. — Pp. 1843-1863.
6. *Molyarova et al. (2018)* Chemical Signatures of the FU Ori Outbursts // *Astrophys. J* — 2018. — V. 866. — Pp. 46.
7. *Hasegawa & Herbst (1993)* Three-Phase Chemical Models of Dense Interstellar Clouds - Gas Dust Particle Mantles and Dust Particle Surfaces // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 1993. — V. 263. — Pp. 589.
8. *Garrod & Pauly (2011)* On the Formation of CO₂ and Other Interstellar Ices // *Astrophys. J* — 2011. — V. 735. — Pp. 15.

9. *Garrod (2013)* A Three-phase Chemical Model of Hot Cores: The Formation of Glycine // *Astrophys. J* — 2013. — V. 765. — Pp. 60.
10. *Vasyunin, Caselli, Dulieu, & Jiménez-Serra (2017)* Formation of Complex Molecules in Prestellar Cores: A Multilayer Approach // *Astrophys. J* — 2017. — V. 842. — Pp. 33.
11. *Marcelino et al. (2007)* Discovery of Interstellar Propylene (CH_2CHCH_3): Missing Links in Interstellar Gas-Phase Chemistry // *Astrophys. J. Let* — 2007. — V. 665. — Pp. L127-L130.
12. *Bacmann et al. (2012)* Detection of complex organic molecules in a prestellar core: a new challenge for astrochemical models // *Astron. and Astrophys* — 2012. — V. 541. — Pp. L12.
13. *Cernicharo et al. (2012)* Discovery of the Methoxy Radical, CH_3O , toward B1: Dust Grain and Gas-phase Chemistry in Cold Dark Clouds // *Astrophys. J. Let* — 2012. — V. 759. — Pp. L43.
14. *Nagy et al. (2019)* The chemical structure of the very young starless core L1521E // *Astron. and Astrophys* — 2019. — V. 630. — Pp. A136.
15. *Scibelli, Shirley, Vasyunin, & Launhardt (2021)* Detection of complex organic molecules in young starless core L1521E // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2021. — V. 504. — Pp. 5754-5767.
16. *Megías et al. (2023)* The complex organic molecular content in the L1517B starless core // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2023. — V. 519. — Pp. 1601-1617.
17. *Jiménez-Serra et al. (2021)* The Complex Organic Molecular Content in the L1498 Starless Core // *Astrophys. J* — 2021. — V. 917. — Pp. 44.

18. *Jiménez-Serra et al. (2016)* The Spatial Distribution of Complex Organic Molecules in the L1544 Pre-stellar Core // *Astrophys. J. Let* — 2016. — V. 830. — Pp. L6.
19. *Caselli et al. (2022)* The Central 1000 au of a Prestellar Core Revealed with ALMA. II. Almost Complete Freeze-out // *Astrophys. J* — 2022. — V. 929. — Pp. 13.
20. *Ruud et al. (2015)* Modelling complex organic molecules in dense regions: Eley-Rideal and complex induced reaction // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2015. — V. 447. — Pp. 4004-4017.
21. *Shingledecker, Tennis, Le Gal, & Herbst (2018)* On Cosmic-Ray-driven Grain Chemistry in Cold Core Models // *Astrophys. J* — 2018. — V. 861. — Pp. 20.
22. *Bergner, Öberg, & Rajappan (2017)* Methanol Formation via Oxygen Insertion Chemistry in Ices // *Astrophys. J* — 2017. — V. 845. — Pp. 29.
23. *Vasyunin & Herbst (2013)* Reactive Desorption and Radiative Association as Possible Drivers of Complex Molecule Formation in the Cold Interstellar Medium // *Astrophys. J* — 2013. — V. 769. — Pp. 34.
24. *Keto & Caselli (2010)* Dynamics and depletion in thermally supercritical starless cores // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2010. — V. 402. — Pp. 1625-1634.
25. *Öberg et al. (2011)* The Spitzer Ice Legacy: Ice Evolution from Cores to Protostars // *Astrophys. J* — 2011. — V. 740. — Pp. 109.
26. *McClure et al. (2023)* An Ice Age JWST inventory of dense molecular cloud ices // *Nature Astronomy* — 2023. — V. 7. — Pp. 431-443.
27. *Dartois et al. (2024)* Spectroscopic sizing of interstellar icy grains with JWST // *Nature Astronomy* — 2024. — V. 8. — Pp. 359-367.

28. *Balucani, Ceccarelli, & Taquet (2015)* Formation of complex organic molecules in cold objects: the role of gas-phase reactions. // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2015. — V. 449. — Pp. L16-L20.
29. *Jin & Garrod (2020)* Formation of Complex Organic Molecules in Cold Interstellar Environments through Nondiffusive Grain-surface and Ice-mantle Chemistry // *Astrophys. J. Suppl* — 2020. — V. 249. — Pp. 26.
30. *Fedoseev et al. (2015)* Experimental evidence for glycolaldehyde and ethylene glycol formation by surface hydrogenation of CO molecules under dense molecular cloud conditions // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2015. — V. 448. — Pp. 1288-1297.
31. *Ioppolo et al. (2021)* A non-energetic mechanism for glycine formation in the interstellar medium // *Nature Astronomy* — 2021. — V. 5. — Pp. 197-205.
32. *Hasegawa, Herbst, & Leung (1992)* Models of Gas-Grain Chemistry in Dense Interstellar Clouds with Complex Organic Molecules // *Astrophys. J. Suppl* — 1992. — V. 82. — Pp. 167.
33. *Garrod & Herbst (2006)* Formation of methyl formate and other organic species in the warm-up phase of hot molecular cores // *Astron. and Astrophys* — 2006. — V. 457. — Pp. 927-936.
34. *Semenov & Wiebe (2011)* Chemical Evolution of Turbulent Protoplanetary Disks and the Solar Nebula // *Astrophys. J. Suppl* — 2011. — V. 196. — Pp. 25.
35. *Lee (2007)* Chemical Evolution in VeLLOs // *Journal of Korean Astronomical Society* — 2007. — V. 40. — Pp. 83-89.

36. *Sharma et al. (2020)* Constraining the Chemical Signatures and the Outburst Mechanism of the Class 0 Protostar HOPS 383 // *Astrophys. J* — 2020. — V. 904. — Pp. 78.
37. *Goto et al. (2018)* The first frost in the Pipe Nebula // *Astron. and Astrophys* — 2018. — V. 610. — Pp. A9.
38. *Boogert, Gerakines, & Whittet (2015)* Observations of the icy universe. // *An. Rev. Astron. Astrophys* — 2015. — V. 53. — Pp. 541-581.
39. *Molyarova et al. (2017)* Gas Mass Tracers in Protoplanetary Disks: CO is Still the Best // *Astrophys. J* — 2017. — V. 849. — Pp. 130.
40. *Lee et al. (1998)* Bistability in large chemical networks: a global view // *Astron. and Astrophys* — 1998. — V. 334. — Pp. 1047-1055.
41. *Clément et al. (2023)* Astrochemical models of interstellar ices: History matters // *Astron. and Astrophys* — 2023. — V. 675. — Pp. A165.
42. *Terada et al. (2007)* Detection of Water Ice in Edge-on Protoplanetary Disks: HK Tauri B and HV Tauri C // *Astrophys. J* — 2007. — V. 667. — Pp. 303-307.
43. *Zuckerman, Morris, Palmer, & Turner (1972)* Observations of cs, HCN, U89.2, and U90.7 in NGC 2264 // *Astrophys. J. Let* — 1972. — V. 173. — Pp. L125.
44. *van 't Hoff et al. (2021)* Imaging the water snowline around protostars with water and HCO⁺ isotopologues // *arXiv e-prints* — 2021. — Pp. arXiv:2110.08286.
45. *Simončič et al. (2020)* Sensitivity of gas-grain chemical models to surface reaction barriers. Effect from a key carbon-insertion reaction, C + H₂ → CH₂ // *Astron. and Astrophys* — 2020. — V. 637. — Pp. A72.

46. *Karssemeijer & Cuppen (2014)* Diffusion-desorption ratio of adsorbed CO and CO₂ on water ice // *Astron. and Astrophys* — 2014. — V. 569. — Pp. A107.
47. *Fredon et al. (2021)* Quantification of the Role of Chemical Desorption in Molecular Clouds // *Accounts of Chemical Research* — 2021. — V. 54. — Pp. 745-753.
48. *Herbst & Garrod (2022)* Synthetic approaches to complex organic molecules (COMs) in the cold interstellar medium // *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* — 2022. — V. 8. — Pp. 209.
49. *Garrod et al. (2022)* Formation of Complex Organic Molecules in Hot Molecular Cores through Nondiffusive Grain-surface and Ice-mantle Chemistry // *Astrophys. J. Suppl* — 2022. — V. 259. — Pp. 1.
50. *Minissale, Dulieu, Cazaux, & Hocuk (2016)* Dust as interstellar catalyst. I. Quantifying the chemical desorption process // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 585. — Pp. A24.
51. *Minissale & Dulieu (2014)* Influence of surface coverage on the chemical desorption process // *J. Chem. Phys.* — 2014. — V. 141. — Pp. 014304.
52. *Cazaux, Minissale, Dulieu, & Hocuk (2016)* Dust as interstellar catalyst. II. How chemical desorption impacts the gas // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 585. — Pp. A55.
53. *Garrod, Wakelam, & Herbst (2007)* Non-thermal desorption from interstellar dust grains via exothermic surface reactions // *Astron. and Astrophys* — 2007. — V. 467. — Pp. 1103-1115.
54. *Fredon & Cuppen (2018)* Molecular dynamics simulations of energy dissipation and non-thermal diffusion on amorphous solid water // *Physical*

- Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)* — 2018. — V. 20. — Pp. 5569-5577.
55. *Chuang et al. (2018)* Reactive Desorption of CO Hydrogenation Products under Cold Pre-stellar Core Conditions // *Astrophys. J* — 2018. — V. 853. — Pp. 102.
 56. *Oba et al. (2018)* An infrared measurement of chemical desorption from interstellar ice analogues // *Nature Astronomy* — 2018. — V. 2. — Pp. 228-232.
 57. *Furuya, Oba, & Shimonishi (2022)* Quantifying the Chemical Desorption of H₂S and PH₃ from Amorphous Water-ice Surfaces // *Astrophys. J* — 2022. — V. 926. — Pp. 171.
 58. *Santos, Linnartz, & Chuang (2023)* Interaction of H₂S with H atoms on grain surfaces under molecular cloud conditions // *Astron. and Astrophys* — 2023. — V. 678. — Pp. A112.
 59. *Hasegawa & Herbst (1993)* New gas-grain chemical models of quiescent dense interstellar clouds: the effects of H₂ tunnelling reactions and cosmic ray induced desorption. // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 1993. — V. 261. — Pp. 83-102.
 60. *Prasad & Tarafdar (1983)* UV radiation field inside dense clouds - Its possible existence and chemical implications // *Astrophys. J* — 1983. — V. 267. — Pp. 603-609.
 61. *Bertin et al. (2016)* UV Photodesorption of Methanol in Pure and CO-rich Ices: Desorption Rates of the Intact Molecule and of the Photofragments // *Astrophys. J. Let* — 2016. — V. 817. — Pp. L12.
 62. *Cruz-Diaz, Martín-Doménech, Muñoz Caro, & Chen (2016)* Negligible photodesorption of methanol ice and active photon-induced desorption of

- its irradiation products // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 592. — Pp. A68.
63. *Fayolle et al. (2011)* CO Ice Photodesorption: A Wavelength-dependent Study // *Astrophys. J. Let* — 2011. — V. 739. — Pp. L36.
 64. *Punanova et al. (2022)* Methanol Mapping in Cold Cores: Testing Model Predictions // *Astrophys. J* — 2022. — V. 927. — Pp. 213.
 65. *Garrod, Belloche, Müller, & Menten (2017)* Exploring molecular complexity with ALMA (EMoCA): Simulations of branched carbon-chain chemistry in Sgr B2(N) // *Astron. and Astrophys* — 2017. — V. 601. — Pp. A48.
 66. *Garrod (2008)* A new modified-rate approach for gas-grain chemical simulations // *Astron. and Astrophys* — 2008. — V. 491. — Pp. 239-251.
 67. *Garrod et al. (2009)* A New Modified-Rate Approach For Gas-Grain Chemistry: Comparison with a Unified Large-Scale Monte Carlo Simulation // *Astrophys. J. Let* — 2009. — V. 700. — Pp. L43-L46.
 68. *Cuppen, van Dishoeck, Herbst, & Tielens (2009)* Microscopic simulation of methanol and formaldehyde ice formation in cold dense cores // *Astron. and Astrophys* — 2009. — V. 508. — Pp. 275-287.
 69. *Oberg (2016)* Photochemistry and astrochemistry: photochemical pathways to interstellar complex organic molecules // *arXiv e-prints* — 2016. — Pp. arXiv:1609.03112.
 70. *Kalvāns (2018)* The efficiency of photodissociation for molecules in interstellar ices // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2018. — V. 478. — Pp. 2753-2765.

71. *Pilling et al. (2010)* Radiolysis of ammonia-containing ices by energetic, heavy, and highly charged ions inside dense astrophysical environments // *Astron. and Astrophys* — 2010. — V. 509. — Pp. A87.
72. *Fedoseev, Scirè, Baratta, & Palumbo (2018)* Cosmic ray processing of N₂-containing interstellar ice analogues at dark cloud conditions // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2018. — V. 475. — Pp. 1819-1828.
73. *Shingledecker, Vasyunin, Herbst, & Caselli (2019)* On Simulating the Proton-irradiation of O₂ and H₂O Ices Using Astrochemical-type Models, with Implications for Bulk Reactivity // *Astrophys. J* — 2019. — V. 876. — Pp. 140.
74. *Shingledecker et al. (2020)* Efficient Production of S₈ in Interstellar Ices: The Effects of Cosmic-Ray-driven Radiation Chemistry and Nondiffusive Bulk Reactions // *Astrophys. J* — 2020. — V. 888. — Pp. 52.
75. *Ivlev et al. (2023)* Bombardment of CO Ice by Cosmic Rays. I. Experimental Insights into the Microphysics of Molecule Destruction and Sputtering // *Astrophys. J* — 2023. — V. 944. — Pp. 181.
76. *Chacón-Tanarro et al. (2019)* Dust opacity variations in the pre-stellar core L1544 // *Astron. and Astrophys* — 2019. — V. 623. — Pp. A118.
77. *Sipilä et al. (2019)* Why does ammonia not freeze out in the centre of pre-stellar cores? // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2019. — V. 487. — Pp. 1269-1282.
78. *Redaelli et al. (2022)* A Large (≈ 1 pc) Contracting Envelope Around the Prestellar Core L1544 // *Astrophys. J* — 2022. — V. 941. — Pp. 168.
79. *Wakelam & Herbst (2008)* Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Dense Cloud Chemistry // *Astrophys. J* — 2008. — V. 680. — Pp. 371-383.

80. *Watanabe et al. (2010)* Direct Measurements of Hydrogen Atom Diffusion and the Spin Temperature of Nascent H₂ Molecule on Amorphous Solid Water // *Astrophys. J. Let* — 2010. — V. 714. — Pp. L233-L237.
81. *Hama et al. (2012)* The Mechanism of Surface Diffusion of H and D Atoms on Amorphous Solid Water: Existence of Various Potential Sites // *Astrophys. J* — 2012. — V. 757. — Pp. 185.
82. *Hama & Watanabe (2013)* Surface Processes on Interstellar Amorphous Solid Water: Adsorption, Diffusion, Tunneling Reactions, and Nuclear-Spin Conversion // *Chemical Reviews* — 2013. — V. 113. — Pp. 8783-8839.
83. *Cuppen et al. (2017)* Grain Surface Models and Data for Astrochemistry // *Space Sci. Rev.* — 2017. — V. 212. — Pp. 1-58.
84. *Kuwahata, Hama, Kouchi, & Watanabe (2015)* Signatures of Quantum-Tunneling Diffusion of Hydrogen Atoms on Water Ice at 10 K // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — V. 115. — Pp. 133201.
85. *Senevirathne, Andersson, Dulieu, & Nyman (2017)* Hydrogen atom mobility, kinetic isotope effects and tunneling on interstellar ices (I_h and ASW) // *Molecular Astrophysics* — 2017. — V. 6. — Pp. 59-69.
86. *Riedel et al. (2023)* Modelling deuterated isotopologues of methanol towards the pre-stellar core L1544 // *Astron. and Astrophys* — 2023. — V. 680. — Pp. A87.
87. *Álvarez-Barcia, Russ, Kästner, & Lamberts (2018)* Hydrogen transfer reactions of interstellar complex organic molecules // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2018. — V. 479. — Pp. 2007-2015.
88. *Molpeceres et al. (2021)* Carbon Atom Reactivity with Amorphous Solid Water: H₂O Catalyzed Formation of H₂CO // *arXiv e-prints* — 2021. — Pp. arXiv:2110.15887.

89. *Fedoseev et al. (2022)* Hydrogenation of Accreting C Atoms and CO Molecules-Simulating Ketene and Acetaldehyde Formation Under Dark and Translucent Cloud Conditions // *Astrophys. J*— 2022. — V. 924. — Pp. 110.
90. *Johnson, Blitz, & Seakins (2000)* The reaction of methyldiene (CH) with methanol isotopomers // *Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)* — 2000. — V. 2. — Pp. 2549-2553.
91. *Wakelam et al. (2012)* A KInetic Database for Astrochemistry (KIDA) // *Astrophys. J. Suppl* — 2012. — V. 199. — Pp. 21.
92. *Skouteris et al. (2017)* New quantum chemical computations of formamide deuteration support gas-phase formation of this prebiotic molecule // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2017. — V. 468. — Pp. L1-L5.
93. *Douglas et al. (2022)* The Gas-phase Reaction of NH₂ with Formaldehyde (CH₂O) is not a Source of Formamide (NH₂CHO) in Interstellar Environments // *Astrophys. J. Let* — 2022. — V. 937. — Pp. L16.
94. *Papakondylis & Mavridis (2019)* Electronic Structure and Bonding of the Fastidious Species CN₂ and CP₂: A First-Principles Study // *Journal of Physical Chemistry A* — 2019. — V. 123. — Pp. 10290-10302.
95. *Umemoto et al. (1984)* The Reactions of Hydrogen and Deuterium Atoms with Four Ketenes // *Bulletin of the Chemical Society of Japan* — 1984. — V. 57. — Pp. 2578-2580.
96. *Allen & Robinson (1977)* The molecular composition of dense interstellar clouds. // *Astrophys. J* — 1977. — V. 212. — Pp. 396-415.
97. *Warnatz (1984)* Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation // *Springer, New York* — 1984. — Pp. 209.

98. *Takahashi, Yamamoto, Inomata, & Kogoma (2007)* Shock-tube studies on the reactions of dimethyl ether with oxygen and hydrogen atoms // *International Journal of Chemical Kinetics* — 2007. — V. 39. — Pp. 97-108.
99. *Good & Francisco (2002)* A Computational Study of the Reaction of Methyl Formate with $\cdot\text{H}$ and $\cdot\text{CH}_3$ Radicals // *Journal of Physical Chemistry A* — 2002. — V. 106. — Pp. 1733-1738.
100. *Lamberts et al. (2022)* Methane Formation in Cold Regions from Carbon Atoms and Molecular Hydrogen // *Astrophys. J* — 2022. — V. 928. — Pp. 48.
101. *Qasim et al. (2020)* An experimental study of the surface formation of methane in interstellar molecular clouds // *Nature Astronomy* — 2020. — V. 4. — Pp. 781-785.
102. *Tennis, Loison, & Herbst (2021)* Radiative Association between Neutral Radicals in the Interstellar Medium: $\text{CH}_3 + \text{CH}_3\text{O}$ // *Astrophys. J* — 2021. — V. 922. — Pp. 133.
103. *Minissale et al. (2022)* Thermal Desorption of Interstellar Ices: A Review on the Controlling Parameters and Their Implications from Snowlines to Chemical Complexity // *ACS Earth and Space Chemistry* — 2022. — V. 6. — Pp. 597-630.
104. *Wakelam, Loison, Mereau, & Ruaud (2017)* Binding energies: New values and impact on the efficiency of chemical desorption // *Molecular Astrophysics* — 2017. — V. 6. — Pp. 22-35.
105. *Caselli et al. (1999)* CO Depletion in the Starless Cloud Core L1544 // *Astrophys. J. Let* — 1999. — V. 523. — Pp. L165-L169.

106. *Vastel, Ceccarelli, Lefloch, & Bachiller (2014)* The Origin of Complex Organic Molecules in Prestellar Cores // *Astrophys. J. Let* — 2014. — V. 795. — Pp. L2.
107. *Goto et al. (2021)* Water and methanol ice in L 1544 // *Astron. and Astrophys* — 2021. — V. 651. — Pp. A53.
108. *Garrod, Widicus Weaver, & Herbst (2008)* Complex Chemistry in Star-forming Regions: An Expanded Gas-Grain Warm-up Chemical Model // *Astrophys. J* — 2008. — V. 682. — Pp. 283-302.
109. *Barone et al. (2015)* Gas-phase formation of the prebiotic molecule formamide: insights from new quantum computations. // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2015. — V. 453. — Pp. L31-L35.
110. *Song & Kästner (2016)* Formation of the prebiotic molecule NH_2CHO on astronomical amorphous solid water surfaces: accurate tunneling rate calculations // *Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)* — 2016. — V. 18. — Pp. 29278-29285.
111. *Chuang et al. (2022)* Formation of the Simplest Amide in Molecular Clouds: Formamide (NH_2CHO) and Its Derivatives in H_2O -rich and CO-rich Interstellar Ice Analogs upon VUV Irradiation // *Astrophys. J* — 2022. — V. 933. — Pp. 107.
112. *Minissale, Congiu, & Dulieu (2016)* Direct measurement of desorption and diffusion energies of O and N atoms physisorbed on amorphous surfaces // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 585. — Pp. A146.
113. *Bottinelli et al. (2004)* Complex Molecules in the Hot Core of the Low-Mass Protostar NGC 1333 IRAS 4A // *Astrophys. J* — 2004. — V. 615. — Pp. 354-358.

114. *Simons, Lamberts, & Cuppen (2020)* Formation of COMs through CO hydrogenation on interstellar grains // *Astron. and Astrophys* — 2020. — V. 634. — Pp. A52.
115. *Song & Kästner (2017)* Tunneling Rate Constants for $\text{H}_2\text{CO}+\text{H}$ on Amorphous Solid Water Surfaces // *Astrophys. J* — 2017. — V. 850. — Pp. 118.
116. *Garrod, Park, Caselli, & Herbst (2006)* Are gas-phase models of interstellar chemistry tenable? The case of methanol // *Faraday Discussions* — 2006. — V. 133. — Pp. 51.
117. *Dartois et al. (2018)* Cosmic ray sputtering yield of interstellar H_2O ice mantles. Ice mantle thickness dependence // *Astron. and Astrophys* — 2018. — V. 618. — Pp. A173.
118. *Dartois et al. (2020)* Non-thermal desorption of complex organic molecules. Cosmic-ray sputtering of CH_3OH embedded in CO_2 ice // *Astron. and Astrophys* — 2020. — V. 634. — Pp. A103.
119. *Dartois et al. (2021)* Cosmic ray sputtering yield of interstellar ice mantles. CO and CO_2 ice thickness dependence // *Astron. and Astrophys* — 2021. — V. 647. — Pp. A177.
120. *Wakelam et al. (2021)* Efficiency of non-thermal desorptions in cold-core conditions. Testing the sputtering of grain mantles induced by cosmic rays // *Astron. and Astrophys* — 2021. — V. 652. — Pp. A63.
121. *Sahu et al. (2020)* Constraints of the Formation and Abundances of Methyl Carbamate, a Glycine Isomer, in Hot Corinos // *Astrophys. J* — 2020. — V. 899. — Pp. 65.

122. *Huynh & Violi (2008)* Thermal Decomposition of Methyl Butanoate: Ab Initio Study of a Biodiesel Fuel Surrogate // *The Journal of Organic Chemistry* — 2008. — V. 73. — Pp. 94-101.

Приложение 1

Таблица 3.1: Содержания в конце стадии молекулярного облака. Компоненты, различие содержаний которых в двух- и трёхфазной моделях превышает порядок величины.

Компонент	2 Ph	3 Ph	Компонент	2 Ph	3 Ph
CH_3OH	4.4(−11)	2.9(−9)	iCH_2CN	4.7(−16)	8.7(−9)
CH_3OH^+	1.0(−13)	6.9(−12)	iCH_2	1.3(−17)	1.1(−10)
$\text{C}_3\text{H}_3\text{N}$	4.3(−11)	3.4(−12)	iCH_2NH	4.3(−17)	5.3(−9)
C_4H_4	6.7(−12)	2.1(−13)	iCH_2NH_2	2.2(−17)	2.0(−9)
C_7H_4	1.9(−12)	1.4(−13)	iNH_2	8.4(−14)	1.8(−7)
C_8H_4	1.1(−12)	9.2(−14)	iCH_2OH	1.1(−15)	2.7(−8)
CH_2NH_2	1.6(−11)	2.2(−10)	iOH	5.7(−13)	1.6(−6)
CH_2OH	6.0(−11)	4.0(−9)	iCH_3	7.5(−16)	1.3(−8)
CH_3NH	1.6(−11)	2.2(−10)	iHCO	2.6(−14)	5.0(−10)
$\text{H}_5\text{C}_3\text{N}$	3.1(−11)	1.0(−12)	iCH_3NH	2.2(−17)	1.6(−9)
продолжение следует					

продолжение					
Компонент	2 Ph	3 Ph	Компонент	2 Ph	3 Ph
iC ₉	1.6(−20)	1.9(−12)	iCH ₃ OCH ₃	1.4(−14)	5.3(−11)
iC ₂	3.6(−16)	1.3(−8)	iCH ₃ OH	1.4(−8)	6.8(−7)
iC ₂ H	3.8(−16)	1.5(−8)	iCH ₅ N	5.3(−9)	8.0(−8)
iC ₂ H ₃	5.9(−17)	4.3(−10)	iCHNH	5.8(−23)	2.2(−11)
iC ₂ H ₄	1.3(−11)	1.4(−8)	iNH	8.5(−14)	2.6(−7)
iC ₂ H ₅	9.1(−16)	4.8(−9)	iS	2.4(−18)	6.0(−12)
iC ₂ N	2.9(−16)	8.0(−9)	iFe	1.4(−17)	3.3(−11)
iCN	1.6(−14)	2.1(−7)	iH ₂ O ₂	7.4(−11)	5.7(−9)
iO	6.9(−13)	1.0(−6)	iHS	1.6(−14)	4.7(−10)
iCS	5.3(−11)	4.0(−9)	iHC ₃ N	5.4(−10)	9.5(−8)
iC ₃	4.2(−15)	9.0(−9)	iHC ₃ O	2.0(−16)	1.1(−12)
iC ₃ H	4.0(−15)	3.2(−8)	iHC ₅ N	1.9(−12)	1.7(−9)
iC ₃ H ₂	4.9(−9)	8.4(−8)	iHC ₇ N	1.5(−13)	1.4(−10)
iC ₃ H ₃	8.1(−15)	4.5(−8)	iHC ₉ N	2.5(−15)	1.9(−11)
iC ₃ H ₃ N	2.8(−11)	2.7(−9)	iHCCN	3.0(−16)	1.6(−9)
iC ₃ N	2.2(−16)	6.4(−10)	iSi	3.3(−17)	7.0(−12)
продолжение следует					

продолжение					
Компонент	2 Ph	3 Ph	Компонент	2 Ph	3 Ph
iC ₄	3.2(−17)	1.3(−9)	iMgH	5.4(−17)	3.3(−10)
iC ₄ H	6.2(−17)	3.5(−9)	iMg	4.0(−17)	7.4(−12)
iC ₄ H ₂	8.9(−10)	3.1(−8)	iN ₂ H ₂	1.1(−10)	2.5(−9)
iC ₅	5.1(−18)	1.1(−10)	iNO	8.9(−13)	3.2(−7)
iC ₅ H	6.0(−18)	6.4(−10)	iNa	1.2(−17)	1.8(−11)
iC ₅ H ₂	1.7(−10)	8.0(−9)	iNS	1.4(−14)	2.9(−11)
iC ₅ N	1.2(−18)	7.5(−12)	iO ₂	8.0(−13)	1.1(−11)
iC ₆	1.1(−19)	3.6(−11)	iO ₂ H	1.7(−18)	6.7(−11)
iC ₆ H	3.5(−19)	2.1(−10)	iO ₃	5.7(−11)	3.9(−8)
iC ₆ H ₂	4.6(−11)	2.3(−9)	iOCN	2.9(−15)	2.4(−9)
iC ₇	6.1(−20)	9.6(−12)	iOCS	1.3(−15)	1.1(−9)
iC ₇ H	9.6(−20)	5.4(−11)	iSiH	3.2(−17)	1.1(−11)
iC ₇ H ₂	1.2(−11)	6.2(−10)	iSiH ₂	3.9(−17)	1.7(−10)
iC ₈	2.8(−21)	3.7(−12)	iSiH ₃	3.8(−17)	2.6(−11)
iC ₈ H	1.5(−20)	2.0(−11)	iSO	2.2(−15)	6.7(−10)
iC ₈ H ₂	3.8(−12)	2.0(−10)	iSO ₂	3.7(−19)	4.3(−12)
продолжение следует					

Таблица 3.2: Промежуточная область диска

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отношение после/до	
	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₉	3.0(−24)	3.1(−12)	2.9(−24)	6.5(−14)	0.96	0.02
iC ₂ H ₂	3.7(−12)	6.3(−11)	3.9(−12)	5.5(−11)	1.06	0.87

продолжение следует

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₂ H ₄	2.0(−12)	4.4(−7)	2.1(−12)	4.3(−7)	1.02	0.98
iC ₂ H ₅	4.0(−17)	2.0(−10)	4.1(−17)	1.2(−11)	1.02	0.06
iCH ₂ CO	3.7(−12)	2.1(−13)	3.0(−12)	2.2(−12)	0.80	10.20
iC ₃ H	2.7(−20)	1.7(−11)	2.7(−20)	1.2(−11)	0.98	0.67
iC ₃ H ₂	3.0(−12)	9.5(−7)	2.7(−12)	6.4(−7)	0.89	0.67
iC ₃ H ₃	4.5(−17)	3.0(−7)	3.7(−17)	1.2(−8)	0.83	0.04
iC ₃ H ₃ N	3.4(−17)	3.9(−10)	1.8(−16)	3.9(−10)	5.37	1.01
iC ₄	8.3(−24)	4.3(−13)	8.3(−24)	1.3(−12)	1.00	3.02
iC ₄ H	4.6(−21)	4.7(−10)	5.1(−21)	1.2(−10)	1.11	0.26
iC ₄ H ₂	1.1(−12)	5.3(−9)	1.5(−12)	2.9(−8)	1.38	5.59
iC ₄ H ₄	7.6(−8)	9.4(−12)	1.0(−7)	2.2(−8)	1.37	2366
iC ₅	2.8(−24)	3.4(−10)	2.7(−24)	7.8(−13)	0.95	0.002
iC ₅ H	8.4(−23)	1.1(−9)	9.7(−23)	2.0(−10)	1.15	0.18
iC ₅ H ₂	2.1(−13)	1.0(−8)	4.0(−13)	7.3(−8)	1.93	7.02
iC ₅ H ₄	1.4(−8)	7.4(−12)	2.8(−8)	6.1(−11)	1.91	8.33
iC ₅ N	1.4(−23)	1.0(−12)	1.5(−23)	2.0(−15)	1.06	0.002

продолжение следует

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC₆	6.3(−26)	9.5(−11)	6.8(−26)	1.5(−12)	1.07	0.02
iC₆H	2.9(−24)	3.1(−10)	5.4(−23)	3.9(−10)	18.48	1.27
iC₆H₂	5.2(−14)	2.9(−9)	4.5(−13)	1.4(−7)	8.69	50.47
iC₆H₄	3.6(−9)	2.0(−12)	3.1(−8)	5.7(−10)	8.59	282.22
iC₇	3.8(−27)	2.3(−11)	3.5(−27)	7.9(−14)	0.94	0.003
iC₇H	7.7(−26)	7.5(−11)	1.6(−25)	2.0(−11)	2.02	0.27
iC₇H₂	1.3(−14)	7.0(−10)	3.9(−14)	7.4(−9)	2.93	10.59
iC₇H₄	9.1(−10)	4.8(−13)	2.6(−9)	6.7(−12)	2.90	14.00
iC₈	6.9(−29)	8.1(−12)	8.8(−29)	6.6(−14)	1.27	0.01
iC₈H	1.5(−26)	2.6(−11)	6.5(−26)	1.7(−11)	4.47	0.64
iC₈H₂	4.3(−15)	2.4(−10)	2.1(−14)	6.1(−9)	4.88	25.61
iC₈H₄	2.9(−10)	1.6(−13)	1.4(−9)	5.5(−12)	4.83	34.16
iC₉H	3.0(−24)	1.0(−11)	2.9(−24)	1.6(−11)	0.97	1.60
iC₉H₂	1.9(−15)	9.2(−11)	1.9(−14)	5.9(−9)	10.10	63.73
iC₉H₄	1.2(−10)	6.2(−14)	1.2(−9)	4.2(−12)	10.00	67.26
iCH₂CN	2.1(−21)	2.3(−11)	1.1(−20)	9.1(−13)	5.10	0.04
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iCH ₂ NH	8.3(−22)	5.5(−12)	1.4(−21)	4.0(−12)	1.72	0.73
iCH ₂ NH ₂	4.2(−22)	5.5(−12)	7.1(−22)	7.5(−14)	1.72	0.01
iNH ₂	8.2(−17)	9.1(−7)	8.3(−17)	5.3(−8)	1.01	0.06
iOH	1.6(−16)	1.9(−11)	1.6(−16)	2.1(−11)	1.00	1.11
iCH ₃ C ₄ H	3.2(−10)	1.9(−12)	5.8(−10)	7.6(−9)	1.82	3973.33
iCH ₃ C ₆ H	4.0(−14)	1.1(−14)	2.1(−11)	1.7(−12)	525.18	161.78
iH ₂ CO	1.2(−10)	1.9(−9)	1.1(−10)	6.1(−11)	0.90	0.03
iCH ₃ OH	2.9(−8)	7.9(−11)	2.9(−8)	5.9(−10)	0.99	7.55
iFe	4.7(−21)	1.8(−10)	4.8(−21)	5.2(−12)	1.01	0.03
iH ₂ O ₂	6.3(−14)	1.6(−7)	6.1(−14)	4.4(−9)	0.97	0.03
iHC ₃ N	6.5(−16)	8.6(−9)	3.4(−15)	8.6(−9)	5.31	1.00
iHC ₅ N	1.8(−17)	1.5(−10)	2.0(−17)	1.5(−10)	1.12	1.01
iHC ₇ N	1.4(−18)	1.2(−11)	1.5(−18)	1.3(−11)	1.03	1.04
iHC ₉ N	4.8(−26)	1.5(−12)	5.0(−25)	1.6(−12)	10.29	1.02
iMgH	3.3(−20)	1.1(−9)	3.3(−20)	3.7(−11)	1.01	0.03
iMg	3.5(−31)	3.6(−11)	3.3(−31)	1.5(−13)	0.94	0.004
продолжение следует						

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отношение после/до	
	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₉	1.5(−20)	4.9(−12)	1.5(−20)	1.1(−11)	1.00	2.17
iC ₂	2.3(−16)	4.1(−8)	9.1(−16)	1.6(−9)	4.01	0.04
iC ₂ H	2.3(−16)	3.4(−8)	9.2(−16)	7.4(−11)	3.92	0.002
iC ₂ H ₃	2.9(−17)	7.8(−10)	8.1(−17)	2.2(−9)	2.81	2.89
<i>продолжение следует</i>						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₂ H ₄	4.5(−11)	3.6(−8)	1.1(−10)	1.9(−8)	2.50	0.53
iC ₂ H ₅	1.7(−15)	7.8(−9)	2.9(−15)	4.2(−9)	1.72	0.54
iC ₂ N	1.1(−16)	1.2(−8)	1.3(−16)	4.7(−10)	1.17	0.04
iCN	1.8(−14)	2.3(−7)	1.9(−14)	7.5(−10)	1.00	0.003
iC ₂ O	1.2(−23)	1.8(−9)	4.5(−23)	2.6(−8)	3.91	14.48
iCO	1.3(−5)	8.9(−7)	1.3(−5)	1.9(−6)	1.00	2.12
iO	1.0(−13)	4.0(−6)	1.0(−13)	7.0(−9)	0.99	0.002
iC ₂ S	7.0(−23)	1.5(−13)	2.6(−22)	2.2(−9)	3.80	1.4(4)
iCS	9.9(−11)	6.3(−9)	1.0(−10)	4.6(−9)	1.04	0.73
iC ₃	2.2(−19)	1.1(−7)	6.3(−19)	1.5(−10)	2.79	0.001
iC ₃ H	8.4(−18)	1.5(−7)	3.3(−18)	5.5(−10)	0.39	0.004
iC ₃ H ₂	4.2(−10)	2.1(−7)	1.1(−10)	3.4(−7)	0.26	1.61
iC ₃ H ₃	1.1(−14)	9.5(−8)	1.1(−14)	5.1(−8)	0.98	0.54
iC ₃ H ₃ N	7.1(−13)	2.3(−9)	3.3(−12)	2.3(−9)	4.58	1.01
iC ₃ N	1.1(−17)	2.0(−9)	1.1(−17)	7.7(−12)	1.01	0.004
iC ₃ O	9.8(−27)	5.2(−10)	3.6(−26)	1.7(−8)	3.64	32.92
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC₄	1.2(−18)	5.0(−9)	1.4(−18)	5.8(−12)	1.16	0.001
iC₄H	6.2(−18)	8.0(−9)	7.2(−18)	1.8(−10)	1.16	0.02
iC ₄ H ₂	1.1(−9)	2.8(−8)	1.3(−9)	5.3(−8)	1.16	1.85
iC₄H₃	9.4(−16)	1.5(−14)	1.1(−15)	1.6(−8)	1.16	1.1(6)
iC₅	7.2(−22)	4.7(−10)	8.3(−22)	5.7(−9)	1.16	12.04
iC ₅ H	7.9(−19)	1.3(−9)	8.1(−19)	3.6(−9)	1.03	2.80
iC ₅ H ₂	2.4(−10)	8.9(−9)	2.4(−10)	2.7(−8)	1.02	3.04
iC ₅ N	8.4(−19)	1.6(−11)	8.4(−19)	1.8(−11)	1.00	1.12
iC ₆	1.8(−24)	1.3(−10)	1.9(−24)	3.5(−10)	1.07	2.65
iC ₆ H	2.2(−19)	3.7(−10)	2.2(−19)	8.4(−10)	1.03	2.31
iC ₆ H ₂	6.4(−11)	2.4(−9)	6.5(−11)	5.8(−9)	1.03	2.43
iC₆H₆	2.1(−12)	1.5(−12)	2.1(−12)	2.4(−9)	1.00	1591.06
iC ₇	7.4(−25)	3.2(−11)	7.7(−25)	2.5(−10)	1.04	7.89
iC ₇ H	5.4(−20)	8.9(−11)	5.6(−20)	1.1(−10)	1.03	1.26
iC ₇ H ₂	1.6(−11)	6.1(−10)	1.7(−11)	6.8(−10)	1.02	1.12
iC ₇ N	1.0(−19)	1.4(−12)	1.0(−19)	1.4(−12)	1.00	1.00
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₈	2.2(−25)	1.2(−11)	2.2(−25)	1.4(−11)	1.04	1.18
iC ₈ H	1.8(−20)	3.2(−11)	1.9(−20)	4.1(−11)	1.03	1.30
iC ₈ H ₂	5.3(−12)	2.0(−10)	5.4(−12)	2.3(−10)	1.02	1.19
iC ₈ H ₄	2.8(−10)	2.8(−11)	2.8(−10)	2.8(−11)	1.00	1.00
iC ₉ H	2.2(−20)	1.2(−11)	2.2(−20)	1.3(−11)	1.01	1.04
iC ₉ H ₂	2.2(−12)	7.9(−11)	2.2(−12)	8.1(−11)	1.02	1.03
iC ₉ H ₄	1.2(−10)	1.1(−11)	1.2(−10)	1.1(−11)	1.00	1.00
iCH ₂ CN	2.0(−16)	6.9(−9)	2.2(−16)	5.2(−9)	1.10	0.76
iCH ₂ NH	4.3(−18)	1.3(−8)	4.4(−18)	9.5(−9)	1.02	0.74
iCH ₂ NH ₂	2.2(−18)	4.6(−9)	2.2(−18)	5.0(−9)	1.02	1.08
iNH ₂	1.1(−13)	1.8(−6)	1.1(−13)	3.0(−9)	1.01	0.002
iCH ₂ OH	5.4(−15)	7.1(−8)	5.3(−15)	5.8(−8)	1.00	0.82
iOH	1.0(−16)	6.7(−6)	1.0(−16)	1.3(−8)	1.00	0.002
iCH ₃	1.7(−19)	6.6(−13)	1.8(−19)	1.6(−12)	1.05	2.46
iCH ₃ C ₄ H	2.9(−13)	2.8(−13)	3.0(−13)	7.5(−12)	1.01	26.31
iCH ₃ C ₅ N	9.0(−14)	5.4(−13)	9.1(−14)	1.1(−12)	1.02	2.05

продолжение следует

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iCH ₃ CHO	5.8(−12)	2.3(−10)	5.8(−12)	2.4(−10)	1.00	1.05
iHCO	2.8(−14)	8.8(−9)	2.8(−14)	5.5(−10)	1.00	0.06
iCH ₃ NH	2.2(−18)	1.4(−8)	2.2(−18)	9.6(−9)	1.02	0.71
iCH ₃ OCH ₃	1.0(−14)	7.3(−10)	1.1(−14)	1.2(−9)	1.11	1.62
iH ₂ CO	2.6(−6)	3.3(−5)	2.6(−6)	2.9(−5)	1.00	0.89
iCH ₃ OH	2.0(−7)	4.0(−6)	2.0(−7)	4.0(−6)	1.00	1.00
iCH ₅ N	4.4(−9)	1.2(−7)	4.4(−9)	1.2(−7)	1.01	1.06
iCHNH	6.8(−25)	2.3(−10)	2.8(−24)	1.9(−10)	4.12	0.84
iNH	5.7(−14)	9.2(−7)	5.8(−14)	1.6(−9)	1.01	0.002
iFe	5.8(−18)	2.7(−10)	5.9(−18)	1.5(−10)	1.00	0.56
iH ₂ C ₃ N	1.2(−17)	1.0(−12)	7.4(−17)	8.9(−13)	6.29	0.85
iH ₂ O ₂	3.6(−11)	6.6(−8)	3.6(−11)	9.9(−7)	0.99	14.88
iHS	3.0(−13)	1.1(−10)	3.0(−13)	6.2(−10)	1.00	5.67
iHC ₂ O	1.2(−23)	4.4(−10)	4.5(−23)	4.8(−9)	3.91	10.84
iHC ₃ N	1.4(−11)	8.9(−8)	8.8(−11)	1.1(−7)	6.29	1.28
iHC ₃ O	1.1(−26)	4.2(−10)	3.6(−26)	1.6(−9)	3.34	3.75

продолжение следует

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iHC ₅ N	1.1(−12)	1.2(−9)	1.1(−12)	1.5(−9)	1.04	1.23
iHC ₇ N	1.3(−13)	1.0(−10)	1.3(−13)	1.1(−10)	1.03	1.04
iHC ₉ N	1.3(−15)	1.4(−11)	1.7(−15)	1.4(−11)	1.27	1.00
iHCCN	1.1(−16)	3.9(−9)	1.3(−16)	2.3(−9)	1.17	0.60
iHCOOH	1.6(−10)	6.1(−10)	1.8(−10)	1.9(−6)	1.19	3077.37
iSi	4.0(−18)	1.9(−10)	4.0(−18)	3.5(−13)	1.00	0.002
iPO	8.5(−13)	8.3(−13)	8.5(−13)	3.5(−11)	1.00	42.64
iMgH	4.1(−17)	1.6(−9)	4.1(−17)	1.5(−9)	1.00	0.97
iMg	4.1(−26)	6.4(−11)	4.1(−26)	6.0(−11)	1.01	0.93
iN ₂	7.7(−9)	5.7(−11)	7.7(−9)	3.1(−8)	1.00	541.97
iN ₂ H ₂	7.9(−11)	5.5(−8)	9.1(−11)	1.7(−7)	1.15	3.04
iNO	1.1(−12)	6.9(−7)	1.1(−12)	5.8(−7)	1.00	0.85
iNa	1.9(−18)	9.2(−11)	2.0(−18)	8.9(−11)	1.00	0.97
iNH ₂ OH	4.3(−28)	1.8(−26)	1.1(−15)	9.9(−8)	2.5(12)	5.5(18)
iNH ₂ CHO	9.4(−9)	2.8(−9)	1.5(−8)	5.7(−7)	1.57	206.59
iNO ₂	1.3(−18)	1.3(−18)	8.1(−18)	6.1(−10)	6.12	4.8(8)
продолжение следует						

<i>продолжение</i>						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iNS	2.9(−13)	2.0(−9)	2.9(−13)	1.4(−9)	1.00	0.71
iO₂	3.3(−16)	3.4(−11)	2.5(−15)	1.3(−7)	7.56	3906.20
iO ₂ H	4.7(−19)	3.2(−8)	4.7(−19)	2.0(−7)	1.00	6.30
iO ₃	1.8(−12)	1.6(−6)	1.3(−11)	1.9(−6)	7.50	1.18
iOCN	3.2(−16)	1.5(−8)	3.2(−16)	9.9(−9)	1.00	0.64
iOCS	8.6(−15)	6.7(−10)	8.7(−15)	5.3(−10)	1.01	0.80
iS₂	2.9(−13)	2.9(−13)	3.0(−13)	4.2(−12)	1.03	14.44
iSiH	4.0(−18)	1.2(−10)	4.0(−18)	1.2(−10)	1.00	0.94
iSiH ₂	1.5(−17)	4.4(−10)	1.5(−17)	2.7(−10)	1.00	0.60
iSiH ₃	1.5(−17)	2.1(−10)	1.5(−17)	2.4(−10)	1.00	1.18
iSO	6.7(−16)	2.3(−8)	6.7(−16)	1.8(−8)	0.99	0.80
iSO₂	3.4(−23)	2.1(−10)	2.1(−22)	3.9(−9)	6.22	18.18
iC ₂ H ₅ OH	1.5(−13)	7.4(−10)	1.5(−13)	1.2(−9)	1.01	1.62

Таблица 3.4: Экстремально внешняя область

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отн-е после/до	
	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₉	2.3(−20)	7.1(−12)	3.0(−20)	5.7(−12)	1.33	0.80
iC ₂	4.0(−16)	5.9(−8)	2.2(−14)	3.2(−8)	55.69	0.54
iC ₂ H	4.2(−16)	4.4(−8)	2.4(−14)	2.0(−9)	56.36	0.05
iC ₂ H ₂	2.2(−11)	4.6(−11)	7.9(−10)	1.2(−8)	36.42	259.62
iC ₂ H ₃	3.9(−17)	1.4(−9)	9.9(−16)	1.3(−9)	25.21	0.88
iC ₂ H ₄	6.9(−11)	3.7(−8)	2.6(−10)	4.0(−8)	3.78	1.07
iC ₂ H ₅	2.6(−15)	1.5(−8)	6.6(−15)	1.2(−8)	2.52	0.80
iC ₂ N	1.6(−16)	1.7(−8)	1.4(−15)	1.7(−9)	9.03	0.10
iCN	2.7(−14)	2.8(−7)	1.7(−13)	4.3(−9)	6.34	0.02
iC ₂ O	5.3(−22)	6.0(−12)	4.4(−18)	3.7(−11)	8204.29	6.09
iCO	2.2(−5)	6.6(−6)	2.1(−5)	2.0(−6)	0.96	0.30
iO	1.9(−13)	5.2(−6)	3.1(−13)	7.3(−9)	1.67	0.001
iC₂S	2.8(−19)	1.8(−12)	5.3(−17)	1.8(−11)	187.74	10.33
iCS	1.4(−10)	7.5(−9)	1.4(−10)	3.4(−9)	1.05	0.45
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC₃	1.2(−18)	1.3(−7)	1.2(−16)	2.8(−10)	99.45	0.002
iC ₃ H	1.9(−17)	1.4(−7)	2.5(−16)	1.7(−7)	12.66	1.26
iC ₃ H ₂	6.0(−10)	1.7(−7)	6.3(−10)	2.4(−7)	1.05	1.43
iC ₃ H ₃	1.5(−14)	1.0(−7)	2.2(−14)	8.0(−8)	1.41	0.80
iC ₃ H ₃ N	1.0(−12)	2.1(−9)	7.4(−12)	2.4(−9)	7.15	1.10
iC ₃ N	1.7(−17)	5.5(−9)	1.1(−16)	4.4(−9)	6.59	0.80
iC₃O	1.3(−24)	2.1(−10)	6.3(−18)	1.6(−8)	4.8(6)	78.19
iC ₄	2.7(−18)	7.1(−9)	7.1(−18)	5.7(−9)	2.64	0.80
iC ₄ H	1.4(−17)	9.3(−9)	3.0(−17)	8.6(−9)	2.22	0.92
iC ₄ H ₂	1.6(−9)	2.8(−8)	1.6(−9)	3.1(−8)	1.02	1.10
iC₄H₃	1.4(−15)	1.1(−14)	1.4(−15)	4.3(−11)	1.02	3849.54
iC ₅	4.3(−20)	7.2(−10)	2.8(−19)	5.8(−10)	6.57	0.80
iC ₅ H	1.7(−18)	1.5(−9)	3.0(−18)	1.3(−9)	1.72	0.89
iC ₅ H ₂	3.4(−10)	8.5(−9)	3.5(−10)	8.9(−9)	1.02	1.04
iC ₅ N	1.2(−18)	3.2(−11)	1.8(−18)	2.6(−11)	1.50	0.81
iC ₆	1.2(−20)	1.9(−10)	3.2(−20)	1.6(−10)	2.72	0.80
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₆ H	4.6(−19)	4.3(−10)	7.1(−19)	3.7(−10)	1.53	0.88
iC ₆ H ₂	9.0(−11)	2.3(−9)	9.2(−11)	2.4(−9)	1.02	1.04
iC ₇	4.1(−21)	4.8(−11)	2.4(−21)	3.8(−11)	0.60	0.80
iC ₇ H	1.2(−19)	1.0(−10)	1.6(−19)	9.1(−11)	1.38	0.88
iC ₇ H ₂	2.3(−11)	5.8(−10)	2.3(−11)	6.0(−10)	1.02	1.04
iC ₇ N	1.4(−19)	2.3(−12)	2.0(−19)	1.9(−12)	1.43	0.81
iC ₈	1.5(−21)	1.7(−11)	4.8(−22)	1.4(−11)	0.33	0.80
iC ₈ H	3.9(−20)	3.7(−11)	5.4(−20)	3.2(−11)	1.38	0.88
iC ₈ H ₂	7.5(−12)	1.9(−10)	7.6(−12)	1.9(−10)	1.02	1.04
iC ₉ H	3.8(−20)	1.4(−11)	5.0(−20)	1.2(−11)	1.33	0.89
iC ₉ H ₂	3.1(−12)	7.4(−11)	3.1(−12)	7.7(−11)	1.02	1.04
iC ₉ H ₄	1.1(−10)	1.1(−11)	1.1(−10)	1.1(−11)	1.00	1.00
iCH	2.2(−21)	9.2(−15)	3.9(−20)	4.1(−12)	17.80	449.05
iCH ₂ CN	2.9(−16)	1.7(−8)	2.2(−15)	1.8(−8)	7.50	1.06
iCH ₂	2.4(−18)	9.5(−11)	5.2(−18)	4.5(−10)	2.16	4.70
iCH ₂ NH	1.0(−17)	4.5(−8)	1.1(−16)	3.8(−8)	11.41	0.83
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iCH ₂ NH ₂	5.0(−18)	3.5(−8)	5.7(−17)	3.2(−8)	11.40	0.91
iNH ₂	7.0(−14)	1.4(−6)	8.7(−14)	3.2(−7)	1.24	0.23
iCH ₂ OH	5.4(−15)	5.2(−7)	5.3(−15)	4.2(−7)	0.98	0.82
iOH	1.5(−13)	1.0(−5)	1.9(−13)	4.2(−6)	1.31	0.42
iCH ₃	1.5(−16)	3.6(−8)	5.3(−16)	5.4(−9)	3.43	0.15
iCH ₃ C ₃ N	1.2(−11)	4.4(−10)	1.2(−11)	4.5(−10)	1.00	1.02
iCH ₃ C ₅ N	9.5(−14)	2.0(−12)	9.5(−14)	2.1(−12)	1.00	1.02
iCH ₃ CHO	4.9(−12)	1.3(−9)	4.9(−12)	1.3(−9)	1.00	1.04
iHCO	4.7(−14)	2.4(−8)	4.6(−14)	3.2(−9)	0.98	0.13
iCH ₃ NH	5.0(−18)	2.9(−8)	5.7(−17)	2.8(−8)	11.40	0.95
iCH ₃ OCH ₃	1.9(−14)	1.0(−8)	1.9(−14)	1.1(−8)	1.00	1.03
iH ₂ CO	2.6(−6)	2.7(−5)	2.6(−6)	2.6(−5)	1.00	0.97
iCH ₃ OH	1.4(−7)	8.1(−6)	1.4(−7)	8.2(−6)	1.00	1.01
iCH ₅ N	5.6(−9)	1.5(−7)	5.6(−9)	1.7(−7)	1.00	1.11
iCHNH	9.0(−25)	2.0(−10)	2.6(−23)	1.6(−10)	29.47	0.81
iNH	3.8(−14)	8.2(−7)	4.4(−14)	1.5(−9)	1.18	0.002
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iS	1.7(−18)	3.6(−11)	2.9(−18)	3.2(−11)	1.73	0.88
iFe	8.3(−18)	4.0(−10)	1.2(−17)	3.2(−10)	1.41	0.80
iH ₂ C ₃ N	1.7(−17)	8.6(−12)	4.9(−17)	6.9(−12)	2.87	0.81
iH ₂ CN	5.3(−19)	4.7(−12)	8.9(−17)	1.4(−11)	168.76	2.89
iH ₂ O ₂	8.5(−11)	6.5(−8)	8.4(−11)	2.5(−7)	0.99	3.81
iHS	3.1(−13)	6.8(−9)	3.1(−13)	6.4(−10)	1.00	0.09
iH ₄ C ₃ N	1.7(−17)	7.9(−12)	1.2(−16)	6.4(−12)	7.12	0.81
iHC₂O	5.3(−22)	7.1(−12)	4.4(−18)	1.1(−10)	8343.38	15.62
iHC ₃ N	2.0(−11)	1.2(−7)	5.8(−11)	1.2(−7)	2.88	1.01
iHC ₃ O	2.8(−22)	1.5(−9)	7.2(−18)	2.5(−9)	2.5(4)	1.67
iHC ₅ N	1.5(−12)	1.2(−9)	1.6(−12)	1.3(−9)	1.05	1.01
iHC ₇ N	1.8(−13)	1.0(−10)	1.8(−13)	1.0(−10)	1.02	1.00
iHC ₉ N	8.1(−16)	1.4(−11)	9.1(−16)	1.4(−11)	1.12	1.00
iHCCN	1.6(−16)	4.2(−9)	1.4(−15)	1.3(−8)	9.06	3.16
iHCOOH	1.7(−10)	1.7(−10)	4.4(−10)	6.5(−7)	2.59	3817.32
iSi	4.9(−18)	2.2(−10)	6.9(−18)	1.4(−10)	1.42	0.64
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iMgH	5.8(−17)	1.9(−9)	8.2(−17)	1.6(−9)	1.41	0.82
iMg	3.0(−23)	2.2(−10)	1.8(−23)	1.8(−10)	0.60	0.80
iN ₂ H ₂	1.9(−11)	5.7(−8)	7.1(−11)	5.9(−8)	3.71	1.02
iNO	1.9(−12)	2.0(−6)	2.4(−12)	7.9(−7)	1.24	0.39
iNa	2.8(−18)	1.5(−10)	3.9(−18)	1.2(−10)	1.41	0.80
iNH ₂ CHO	2.9(−9)	1.4(−8)	3.0(−9)	3.4(−8)	1.02	2.36
iNH₂OH	2.8(−28)	8.6(−29)	7.9(−20)	8.3(−9)	2.8e(8)	9.5(19)
iNS	2.9(−13)	1.6(−9)	2.7(−13)	7.3(−10)	0.95	0.46
iO₂	1.1(−16)	9.1(−12)	8.8(−15)	5.5(−8)	79.91	6026.36
iO₂H	1.1(−18)	3.8(−11)	1.1(−18)	9.5(−7)	0.99	2.5(4)
iO ₃	5.6(−15)	2.5(−7)	9.9(−13)	5.8(−7)	175.88	2.30
iOCN	7.7(−16)	1.2(−8)	4.9(−15)	4.4(−9)	6.35	0.36
iOCS	4.3(−15)	6.4(−9)	1.0(−14)	6.9(−9)	2.34	1.08
iSiH	4.9(−18)	1.7(−10)	6.9(−18)	1.9(−10)	1.42	1.08
iSiH ₂	2.3(−17)	6.4(−10)	3.2(−17)	5.5(−10)	1.41	0.87
iSiH ₃	2.3(−17)	2.3(−10)	3.2(−17)	3.0(−10)	1.41	1.27
продолжение следует						

<i>продолжение</i>						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iSO	2.1(−16)	2.0(−8)	3.6(−15)	1.9(−8)	17.23	0.96
iSO₂	5.1(−23)	1.0(−10)	5.6(−20)	5.9(−9)	1081.33	59.11
iC ₂ H ₅ OH	1.7(−13)	1.0(−8)	1.7(−13)	1.1(−8)	1.00	1.03
iHCS	4.2(−16)	6.8(−14)	4.4(−16)	3.6(−12)	1.05	52.73

Таблица 3.5: Общие потенциальные индикаторы вспышек светимости для двух- и трёхфазной моделей. (Во внешней области общие индикаторы отсутствуют.)

Внутренняя область

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отн-е после/до	
	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
CO ₂	1.1(−05)	1.1(−05)	8.7(−07)	8.7(−07)	0.077	0.077
iHCOOH	4.6(−08)	4.6(−08)	1.7(−10)	1.7(−10)	3.7(−3)	3.8(−3)
iH ₂ O ₂	9.2(−09)	1.9(−08)	8.1(−10)	8.4(−10)	0.088	0.045
N ₂ O	4.2(−09)	4.2(−09)	3.6(−10)	3.6(−10)	0.087	0.087
iCO ₂	7.2(−10)	7.2(−10)	5.5(−11)	5.6(−11)	0.077	0.077
iH ₂ SiO	9.0(−11)	9.0(−11)	2.3(−12)	2.3(−12)	0.026	0.026
H ₂ C ₃ O	3.7(−11)	3.8(−11)	5.5(−10)	6.9(−10)	14.6	18.3
iH ₂ C ₃ O	5.7(−12)	5.7(−12)	8.3(−11)	1.0(−10)	14.5	18.3
iC ₄ H ₄	3.0(−12)	3.1(−12)	8.2(−10)	1.3(−09)	275.9	418.4
iC ₂ H ₆	2.2(−12)	2.2(−12)	2.4(−11)	2.8(−11)	11.1	12.8
iC ₄ H ₂	2.1(−12)	2.3(−12)	8.8(−10)	1.4(−09)	412.4	635.8

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
iC ₆ H ₆	1.4(−13)	1.6(−13)	2.9(−10)	6.4(−10)	2047.2	4064.8
C ₄ H ₂	6.8(−14)	7.2(−14)	2.8(−11)	4.6(−11)	412.4	635.7

Промежуточная область

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отн-е после/до	
	2Ph	3Ph	2Ph	3Ph	2Ph	3Ph
iC ₆ H ₆	2.6(−13)	3.2(−14)	2.1(−07)	8.7(−08)	8.1(5)	2.7(6)
iCH ₃ C ₆ H	4.0(−14)	1.1(−14)	2.1(−11)	1.7(−12)	525.2	161.8

Экстремально внешняя область

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отн-е после/до	
	2Ph	3Ph	2Ph	3Ph	2Ph	3Ph
CO	2.6(−09)	4.0(−10)	9.3(−07)	8.9(−08)	358.3	224.9
NO	4.0(−10)	2.2(−10)	4.7(−09)	6.0(−08)	11.7	274.0
HNO	3.1(−10)	1.6(−10)	3.1(−08)	2.2(−08)	98.3	133.2
CH ₄	6.7(−11)	1.1(−11)	4.0(−08)	8.5(−08)	587.9	7790.1
iC ₂ H ₂	2.2(−11)	4.6(−11)	7.9(−10)	1.2(−08)	36.4	259.6
O	7.9(−12)	4.0(−12)	5.1(−10)	7.5(−10)	64.3	187.3
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
CH ₃	5.2(−12)	8.0(−12)	3.9(−10)	1.4(−09)	74.3	176.0
HCN	2.8(−12)	1.2(−13)	4.4(−09)	1.6(−09)	1616.7	1.3(4)
H ₂ NO ⁺	1.7(−12)	1.1(−12)	7.0(−11)	4.7(−11)	40.1	42.9
CN	1.3(−12)	6.7(−14)	1.6(−09)	8.7(−10)	1234.7	1.3(4)
HCO ⁺	1.3(−12)	2.4(−13)	7.5(−11)	1.6(−11)	57.0	68.9
HNC	8.8(−13)	4.5(−14)	1.8(−09)	1.0(−09)	2047.3	2.2(4)
CH ₂	6.0(−13)	1.2(−12)	1.0(−10)	2.3(−10)	168.2	191.6
C ₃ H ₃	2.7(−13)	1.7(−13)	2.8(−12)	3.2(−12)	10.6	18.5
C	2.3(−13)	5.3(−14)	1.0(−10)	1.3(−11)	456.7	251.3
OCN	1.9(−13)	4.7(−14)	6.1(−12)	7.2(−10)	32.5	1.5(4)
CS	1.4(−13)	3.5(−14)	1.9(−12)	8.6(−11)	14.1	2441.2
C ₂ H ₂	1.4(−13)	1.2(−13)	5.3(−11)	4.9(−11)	369.3	404.5
H ₂ CN ⁺	9.4(−14)	5.0(−15)	5.9(−11)	3.3(−11)	630.9	6691.7
C ₂ H	8.5(−14)	5.8(−14)	1.9(−11)	1.7(−11)	226.2	287.5
C ₃ H ₂	7.1(−14)	1.3(−13)	1.2(−12)	1.1(−11)	17.2	90.4
Cl	6.9(−14)	1.2(−14)	5.8(−11)	5.8(−11)	831.6	4655.0
продолжение следует						

<i>продолжение</i>						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
CH_5^+	6.9(−14)	7.0(−14)	7.2(−12)	2.3(−11)	105.6	324.9
CH	4.7(−14)	8.9(−14)	4.0(−12)	1.1(−11)	86.3	123.7
NO^+	4.6(−14)	2.5(−14)	1.6(−12)	2.9(−12)	34.5	114.0
CH_3CN	4.3(−14)	1.3(−14)	3.6(−12)	2.3(−12)	83.2	184.0
CH_2CN	4.1(−14)	1.3(−14)	8.9(−12)	7.0(−12)	218.0	550.9
C_2H_4	3.2(−14)	4.2(−14)	1.8(−11)	1.6(−10)	558.3	3737.9
C_2H_3	1.4(−14)	3.2(−14)	2.8(−12)	1.1(−11)	200.1	340.0
H_2CN	9.0(−15)	5.5(−15)	1.1(−12)	7.3(−12)	125.4	1337.3
C^+	7.7(−15)	1.2(−15)	1.8(−12)	2.3(−13)	229.3	191.5
$\text{C}_3\text{H}_3\text{N}$	3.3(−15)	5.4(−14)	2.5(−12)	2.8(−11)	767.7	511.9
HC_3N	2.5(−15)	1.6(−14)	7.4(−12)	8.9(−12)	2967.1	548.0
C_2	1.7(−15)	2.0(−15)	3.4(−11)	2.7(−10)	2.0(4)	1.4(5)
C_3N	9.7(−16)	9.4(−15)	1.3(−12)	3.4(−12)	1378.9	366.7
HNC_3	3.2(−16)	2.4(−15)	1.1(−12)	2.1(−12)	3307.9	862.4
P	1.6(−16)	1.9(−18)	8.9(−12)	8.9(−12)	5.4(4)	4.6(6)
HCl	9.6(−17)	1.9(−17)	1.7(−12)	1.4(−12)	1.8(4)	7.4(4)

Приложение 2

Таблица 4.1: Новые реакции в сетке MONACO
с участием CH_3OCO и CH_3NCO .

Реакция	α	β	γ
$\text{CH}_3\text{OCO} \xrightarrow{\text{CRP}} \text{CO}_2 + \text{CH}_3$	1.20(−14)	0.00	0 [121]
$\text{CH}_3\text{OCO} \xrightarrow{h\nu} \text{CO}_2 + \text{CH}_3$	5.00(−10)	0.00	0 [121]
$\text{H}^+ + \text{CH}_3\text{OCO} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCO}^+ + \text{H}$	1.00(−09)	−0.50	0 [121]
$\text{CO}^+ + \text{CH}_3\text{OCO} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCO}^+ + \text{CO}$	1.44(−09)	−0.50	0 [121]
$\text{He}^+ + \text{CH}_3\text{OCO} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCO}^+ + \text{He}$	1.00(−09)	−0.50	0 [121]
$\text{CH}_3\text{OCO}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{CH}_3 + \text{CO}_2$	1.50(−07)	−0.50	0 [121]
$\text{gCH}_3\text{O} + \text{gCO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OCO}$	1.00(+00)	0.00	3967 [29,122]
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{OCO} \rightarrow \text{gHCOOCH}_3$	1.00(+00)	1.00	0 [29]
$\text{gH} + \text{gHCOOCH}_3 \rightarrow \text{gH}_2 + \text{gCH}_3\text{OCO}$	1.00(+00)	1.00	3970 [9,99]
$\text{gCH}_3 + \text{gHCOOCH}_3 \rightarrow \text{gCH}_4 + \text{gCH}_3\text{OCO}$	1.00(+00)	0.00	5040 [9,99]
$\text{gCH}_3\text{O} + \text{gHCOOCH}_3 \rightarrow$ $\rightarrow \text{gCH}_3\text{OH} + \text{gCH}_3\text{OCO}$	1.00(+00)	0.00	3200 [9]
продолжение следует			

продолжение			
Реакция	α	β	γ
$\text{gNH}_2 + \text{gHCOOCH}_3 \rightarrow \text{gNH}_3 + \text{gCH}_3\text{OCO}$	1.00(+00)	0.00	3360 [9]
$\text{gOH} + \text{gHCOOCH}_3 \rightarrow \text{gH}_2\text{O} + \text{gCH}_3\text{OCO}$	1.00(+00)	0.00	600 [9]
$\text{CH}_3\text{NCO} \xrightarrow{\text{CRP}} \text{OCN} + \text{CH}_3$	5.20(−14)	0.00	0 [91]
$\text{H}^+ + \text{CH}_3\text{NCO} \rightarrow \text{H} + \text{CH}_3\text{NCO}^+$	1.00(−09)	−5.00	0 [91]
$\text{He}^+ + \text{CH}_3\text{NCO} \rightarrow \text{He} + \text{CH}_3\text{NCO}^+$	1.00(−09)	−5.00	0 [91]
$\text{CO}^+ + \text{CH}_3\text{NCO} \rightarrow \text{CO} + \text{CH}_3\text{NCO}^+$	1.44(−09)	−5.00	0 [91]
$\text{CH}_3\text{NCO}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{OCN} + \text{CH}_3$	1.50(−07)	−5.00	0 [91]
$\text{CH}_3\text{NCO} \xrightarrow{\text{h}\nu} \text{OCN} + \text{CH}_3$	5.00(−10)	0.00	0 [91]
$\text{gN} + \text{gCH}_3\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{NCO}$	1.00(+00)	0.00	0 [91]