

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

На правах рукописи

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

Научный консультант

к.ф.-м.н. А. И. Васюнин

Москва – 2025

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Вспышки светимости в протопланетных дисках: трёхфазная астрохимическая модель	22
1.1 Введение	22
1.2 Описание модели и рассмотренные области диска	24
1.3 Результаты моделирования	29
1.3.1 Сравнение двух- и трёхфазной моделей на стадии облака	29
1.3.2 Сравнение двух- и трёхфазной моделей на стадии диска	33
1.4 Обсуждение результатов	43
1.4.1 Поведение и области проявления значимых индикаторов вспышки в различных моделях	45
1.4.2 Влияние отношения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ на число индикаторов вспышки	48
1.5 Заключение по Главе 1	50
1.6 Положение, выносимое на защиту по результатам Главы 1 .	52
Глава 2. Образование сложных органических молекул в дозвёздных ядрах: роль недиффузионной поверхностной химии	53
2.1 Введение	53
2.2 Описание модели	58
2.2.1 Трёхфазный код с недиффузионной химией	58
2.2.2 Физический профиль ядра L1544, начальные условия и параметры химической модели	64
2.2.3 Обновления в сетке реакций	67

2.3	Результаты моделирования	69
2.3.1	Определение согласия результатов моделирования и наблюдательных данных	69
2.3.2	Результаты для модели GRD	75
2.3.3	Химические процессы на метанольном пике в модели GRD	82
2.3.4	Сравнение с моделью MRD	90
2.3.5	Варьирование отношения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$	93
2.4	Обсуждение результатов	96
2.4.1	Отношения содержаний COM к метанолу	99
2.4.2	Сравнение с предшествующей моделью и значение туннелирования сквозь барьеры диффузии	100
2.4.3	Коэффициент прилипания	103
2.4.4	Распыление космическими лучами	104
2.5	Заключение по Главе 2	105
2.6	Положения, выносимые на защиту по результатам Главы 2 .	107

Глава 3. Корреляция между содержаниями формальдегида и метанола в холодных плотных ядрах

		108
3.1	Введение	108
3.2	Моделирование	110
3.2.1	Профили физических условий в ядрах	110
3.2.2	Описание модели	111
3.2.3	Результаты моделирования	113
3.2.4	Сравнение результатов моделирования и наблюдений	117
3.3	Обсуждение результатов	121
3.4	Заключение по Главе 3	127
3.5	Положение, выносимое на защиту по результатам Главы 3 .	128

Заключение

129

Литература	132
Приложение 1	159
Приложение 2	175
Приложение 3	178

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 толщ 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 пылинок — один из ключевых компонентов современных астрохимических моделей.

Непосредственные наблюдения состава ледяных мантий возможны далеко не всегда, однако процессы десорбции различной природы способны существенно изменять состав газовой фазы, наблюдать которую гораздо проще. В частности, реактивная десорбция — высвобождение доли продуктов поверхностной реакции в газовую фазу — даже при температурах ниже 10 К, характерных для внутренних областей дозвёздных ядер, может поставлять в газ значительные количества метанола и других сложных органических соединений, образующихся на поверхности пылевых частиц. Особенно сильно от интенсивности реакций, протекающих в ледяных ман-

тиях пылинок, зависят химические процессы в околозвёздном газопылевом веществе во время и после вспышек светимости звезды на ранней стадии её 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.

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. Однако это представление может оказаться слишком упрощённым, так как значимые реакции в адсорбированном веществе в рамках диффузионного механизма (Лэнгмюра–Хиншельвуда) эффективно идут 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 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 [1], а дальнейшее развитие они получили, например, в работах [2–4]. В настоящей работе трёхфазная модель, схожая с упомянутыми, реализована для исследования химических процессов в околозвёздном газопылевом (протопланетном) диске.

Одной из таких задач является исследование химической эволюции протопланетных дисков, окружающих звёзды, которые испытывают вспышки светимости. На ранних эволюционных стадиях у большинства звёзд раз в $2\text{--}5 \times 10^4$ лет или чаще происходят вспышки светимости раз-

личной амплитуды, возможно, связанные с возрастанием темпа аккреции [5]. Усиление светимости достигает 1–2 порядков величины [6, 7]. Подобные вспышки, вероятно, являются неотъемлемой частью эволюции планетных систем, однако количество известных объектов, находящихся в стадии вспышки, — звёзд типа FU Ориона, или фуоров — всего около двух десятков. Как для уточнения статистики, так и для выявления механизма (механизмов) роста светимости этот список важно расширить, включив в него звёзды, у которых вспышка завершилась в недавнем прошлом. Индикатором вспышки светимости, произошедшей несколько сотен лет назад, могут быть изменения химического состава окружающего звезду протопланетного диска. В частности, при помощи двухфазной модели в работах [8] и [9] проводилось моделирование химических изменений в околозвёздном газопылевом веществе в условиях вариации светимости центрального источника (вспышки светимости) с целью выявления вероятных индикаторов вспышечной активности. Как показано этими авторами, 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 проверить предположения о поверхностных химических процессах, которые происходили во время спокойной (довспышечной) стадии эволюции протопланетного диска. Например, во время вспышки можно наблюдать органику, образующуюся на поверхности пыли: метанол CH_3OH , ацетон CH_3COCH_3 , ацетонитрил CH_3CN , ацетальдегид CH_3CHO , метилформиат HCOOCH_3 [10]. Важность состава и эволюции ледяных мантий пылинок в этой задаче подчёркивает необходимость более тщательного моделирования поверхностных процессов.

Другая задача, в которой критическим может оказаться совершенствование моделей химических процессов в ледяных мантиях пылинок, — исследование эволюции сложных органических молекул (СОМ) в холодных

дозвёздных облаках. В астрохимии сложные органические молекулы обычно определяются как углеродсодержащие соединения с числом атомов не менее шести (см., например, [11]). Они детектируются на всех стадиях звездообразования. Их обнаружение в холодной тёмной среде на самых ранних стадиях формирования маломассивных звёзд оказалось неожиданным. За последние десятилетия было предложено несколько сценариев, объясняющих присутствие СОМ в холодном плотном молекулярном газе. Было показано (см., например, [12]), что как минимум при определённых предположениях СОМ в холодном газе могут формироваться в газофазных химических реакциях. Роль химии на поверхности космической пыли в образовании СОМ при температурах порядка 10 К в разных исследованиях оценивалась по-разному. В некоторых работах она считалась вторичной [12, 13], тогда как более новые исследования предполагают, что химические процессы в ледяных мантиях играют определяющую роль [14].

Новый взгляд на поверхностную химию как на ключевой источник СОМ при низких температурах (около 10 К) основан на экспериментальных данных [15], [16] и [17]. В этих работах было показано, что СОМ, содержащие несколько атомов углерода, — такие как гликольальдегид $\text{CH}_2(\text{OH})\text{CHO}$, этиленгликоль $\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2$ и даже простейшая аминокислота глицин $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ — эффективно образуются в лабораторных экспериментах с физическими условиями, подобными условиям 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, достаточно мобильны в ледяных мантиях пылинок, чтобы индуцировать эффективные диффузионные химические реакции [18]. Таким образом, посредством диффузионной химии при температурах 10 К и ниже могут происходить

только реакции гидрирования. Реакции между радикалами, которые требуются для образования СОМ, эффективно идут на пыли при температурах 30–40 К [19] и неэффективны при 10 К, поскольку при этой температуре радикалы неподвижны. Аналогично, неподвижны будут и атомы тяжелее водорода.

Одно из возможных объяснений экспериментальным результатам [15] и [17] состоит в том, что химические реакции между радикалами, ведущие к образованию СОМ, идут даже при 10 К, если радикалы в мантии оказываются вблизи друг друга как продукты процессов, эффективных при 10 К. Подобные процессы включают в себя адсорбцию из газовой фазы, эффективные диффузионные поверхностные реакции, фотореакции и реакции, индуцированные космическими лучами. Химические реакции на пыли между близко расположенными неподвижными частицами могут происходить за рамками диффузионного механизма Лэнгмюра–Хиншельвуда, то есть недиффузионно. В диссертационной работе недиффузионные механизмы реакций в ледяных мантиях пылинок реализованы в астрохимическом коде и применены для моделирования химического состава дозвёздного ядра L1544.

Ключевым прекурсором для многих СОМ является формальдегид H_2CO . Это промежуточное звено в цепочке гидрирования монооксида углерода CO , которая приводит к образованию метанола на поверхности межзвёздных пылинок. Различные астрохимические модели успешно воспроизводят содержания СОМ в холодных плотных ядрах, однако они неизменно завышают содержание формальдегида на порядок величины, что приводит к инвертированному отношению обилий $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$ в астрохимическом моделировании по сравнению с наблюдаемыми значениями. В настоящей работе содержания, рассчитанные недиффузионным астрохимическим кодом, сравниваются с однородным набором карт обилий формальдегида, полученных для семи холодных плотных ядер в волокне L1495 с помощью

30-метрового радиотелескопа IRAM. Выявлены ограничения для астрохимических моделей, следование которым позволило бы точнее воспроизводить наблюдаемое содержание формальдегида и его корреляцию с метанолом. В частности, уточняется коэффициент ветвления реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$ при низких температурах.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения. Число страниц в диссертации 183, рисунков 24, таблиц 16. Список литературы содержит 235 наименований.

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 [20], разработанным в Институте астрономии РАН. Показано, что на стадии, предшествующей формированию диска, рассмотрение различий между поверхностью и толщиной 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, толщина мантии) по сравнению с двухфазной моделью увеличивается количество потенциальных индикаторов вспышки, сохраняющих “нетипичные” содержания на протяжении сотен лет после окончания вспышки. Единственным соединением, которое чув-

ствительно к вспышке в двухфазной модели и нечувствительно к ней в трёхфазной, оказывается адсорбированный формамид NH_2CHO .

В разделе 1.1 отмечается значимость поиска индикаторов вспышек светимости молодых солнцеподобных звёзд и введения многослойной структуры ледяных мантий пылинок. В разделе 1.2 описывается используемая астрохимическая модель и внесённые в неё изменения. Затем сравниваются содержания химических соединений, 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 (раздел 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. В трёхфазный астрохимический код MONACO [4], основанный на уравнениях химической кинетики, были добавлены недиффузионные процессы, новые пути образования ацетальдегида и метана в твёрдой фазе, а также изменение энергий десорбции H и H_2 в соответствии с долей поверхности пылинки, покрытой молекулами H_2 . Результаты моделирования находятся в согласии с наблюдательными данными. Показано, что реакции на поверхности пыли между такими радикалами, как CH_3 , CH_3O и HCO , эффективно протекают в недиффузионном режиме и играют ключевую роль в формировании льдов СОМ. В газовую фазу СОМ доставляются посредством реактивной десорбции, которая усиливается благодаря поверхностным реакциям присоединения и абстракции водорода. По результатам моделирования содержания СОМ во льду находятся в диапа-

зоне 1%–3% (метилформиат HCOOCH_3) либо нескольких десятых процента (ацетальдегид CH_3CHO , диметиловый эфир CH_3OCH_3) по отношению к водяному льду. Обнаружено, что на газофазные содержания СОМ существенно влияет выбор параметризации для эффективности реактивной десорбции. Также предложены ограничения для отношения энергии диффузии поверхностных частиц (E_{diff}) к их энергии десорбции (E_{des}).

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 приведены результаты исследования: определение согласия модельных 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 таким содержаниям компонентов (раздел 2.3.3). Затем представлены 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 отношения содержаний газофазных СОМ и метанола (раздел 2.4.1), роль туннелирования сквозь барьеры диффузии для атомарного и молекулярного водорода и сравнение с предыдущей реализацией кода MONACO (раздел 2.4.2), коэффициент прилипания для адсорбции соединений на пыль (раздел 2.4.3) и внедрение распыления космическими лучами как одного из типов десорбции (раздел 2.4.4). В разделе 2.5 суммируются ключевые результаты данной главы.

В **Главе 3** расчёты, выполненные недиффузионной версией кода MONACO, которая представлена в Главе 2, сравниваются с наблюдаемыми

ми содержаниями формальдегида H_2CO в холодных плотных ядрах. Модель воспроизводит форму профиля H_2CO , однако завышает его содержание в пределах порядка величины. Тестирование показало, что наиболее эффективный способ приблизить модельные содержания к наблюдаемым — добавление дополнительного канала у ключевой реакции $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{CO}$, производящей формальдегид.

В разделе 3.1 отмечается проблема переоценки содержания H_2CO в газовой фазе холодных плотных ядер различными астрохимическими кодами. Раздел 3.2 посвящён моделированию: даны профили физических условий в ядрах (раздел 3.2.1), характеристики модели (раздел 3.2.2), а также результаты расчётов (раздел 3.2.3), в частности, сравнение основной модели с моделью, имеющей дополнительный канал у реакции $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{CO}$. Затем приведено сравнение результатов моделирования с наблюдательными данными (раздел 3.2.4). В разделе 3.3 обсуждаются полученные результаты, а в разделе 3.4 перечислены выводы данной главы.

В **Заключении** представлены основные результаты диссертационной работы. Даны рекомендации для дальнейшего развития темы диссертации.

В **Приложениях 1, 2 и 3** содержатся дополнительные материалы по соответствующим главам.

Цели диссертационной работы

1. Исследовать влияние многослойной структуры ледяных мантий межзвёздных пылинок на химические процессы, происходящие в них до, во время и после вспышек светимости в протопланетных дисках.
2. Изучить влияние 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.

3. Выявить ограничения для астрохимических моделей, следование которым позволило бы точнее воспроизводить наблюдаемое содержание формальдегида и его корреляцию с метанолом.

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 фазах 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.

9. Сравнение содержаний, рассчитанных недиффузионным кодом MONACO, с однородным набором карт обилий формальдегида в холодных плотных ядрах.
10. Исследование путей образования и разрушения формальдегида, а также варьирование параметров модели с целью получить отношение содержаний формальдегида и метанола, близкое к наблюдаемому.

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 метанольного пика 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 $0.1\text{--}3\%$ по отношению к водяному льду. 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. Впервые проведено сравнение содержаний, рассчитанных недиффузионным астрохимическим кодом, с однородным набором карт обилий формальдегида, полученных для холодных плотных ядер, и выявлены ограничения для астрохимических моделей, следование которым позволило бы точнее воспроизводить наблюдаемое содержание формальде-

гида и его корреляцию с метанолом.

Научная и практическая значимость

Предложенные списки индикаторов вспышек светимости в протопланетных дисках могут использоваться для выявления молодых звёзд типа FU Ориона, испытавших 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 планирования наблюдений.

Моделирование содержаний газофазного формальдегида в холодных плотных ядрах выявило недостаток теоретических и экспериментальных знаний о процессах, приводящих к образованию и разрушению формальдегида, и об их скоростях. Полученные в модели ограничения путей химической реакции $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{CO}$ по астрономическим наблюдениям при отсутствии необходимых лабораторных и расчётных данных о её скорости могут помочь в планировании теоретических и экспериментальных исследований реакций с участием формальдегида в газовой фазе.

Методология и методы исследования

Задачи диссертации решались при помощи численного моделирования астрохимическими кодами PRESTA [20] и MONACO [4]. 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 содержания изучаемых соединений.
9. Написан основной текст работ [A1] и [A4], а также раздел “Chemical modelling” работы [A3].

Положения, выносимые на защиту

- Исследован вклад реакций в адсорбированном веществе на формирование молекулярного состава дисков фуоров. Показано, что трёхфазная астрохимическая модель, в отличие от двухфазной, позволяет добиться близких к наблюдаемым содержаний основных углеродсодержащих компонентов ледяных мантий (CO , CO_2 , CH_3OH) на стадии молекулярного облака. Показано, что во внешних областях протопланетного диска трёхфазная модель предлагает большее количество потенциальных индикаторов произошедшей вспышки светимости, чем двухфазная.
- Впервые показано, что модель, включающая в себя недиффузионные химические процессы в ледяных мантиях пылинок, позволяет успешно воспроизвести газофазные содержания сложных органических соединений (CH_3OH , CH_3CHO , CH_3OCH_3 , HCOOCH_3 , NH_2CHO), а также положение пика содержания метанола в дозвёздном ядре L1544. Показано, что для объяснения наблюдаемых содержаний

сложных органических молекул, синтезируемых в поверхностных реакциях, достаточно предположения о реактивной десорбции с эффективностью $\sim 0.1\%$.

- Показано, что теоретические содержания твердофазных сложных органических соединений в дозвёздном ядре L1544 составляют 0.1–3% по отношению ко льду H_2O . Наилучшее согласие с наблюдательными данными достигается при значении отношения барьера диффузии частиц на поверхности пыли к их энергии десорбции, равном 0.5 для атомов и 0.3 для молекул.
- Показано, что разработанная в диссертации недиффузионная версия кода MONACO воспроизводит форму радиального распределения содержания формальдегида в холодных плотных ядрах волокна L1495. Получить количественное согласие между теоретическим и наблюдаемым содержанием формальдегида можно при условии существования низкотемпературного канала у основной реакции синтеза формальдегида $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{CO}$ с коэффициентом ветвления для продуктов реакции $\text{HCO} + \text{H}_2 : \text{H}_2\text{CO} + \text{H} = 8 : 1$.

Апробация

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

1. Конференция молодых учёных ИНАСАН (ИНАСАН, Москва, 24 октября 2019 г.);
2. Конференция молодых учёных ИНАСАН (ИНАСАН, Москва, 05 ноября 2020 г.);
3. Семинар по межзвёздной среде, посвящённый 100-летию В. Г. Горбачёвского (онлайн, 27 мая 2020 г.);

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 г.);
6. Семинар Научной лаборатории астрохимических исследований УрФУ (УрФУ, Екатеринбург, 17 февраля 2022 г.);
7. Конференция молодых учёных ИНАСАН (ИНАСАН, Москва, 09 ноября 2023);
8. The 3rd International Conference on Physics and Chemistry of Combustion and Processes in Extreme Environments (Samara, July 2–6, 2024);
9. Всероссийская конференция “Звздообразование и планетообразование” (АКЦ ФИАН, Москва, 11–13 ноября 2024 г.).

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] **Борщева Е. В.**, Вибе Д. З. Вспышки светимости в протопланетных дисках: трёхфазная астрохимическая модель // *Астрономический журнал* — 2022. — Т. 99. — № 5. — Стр. 389-416.
- [A2] *Jiménez-Serra I., Megías A., Salaris J., Cuppen H., Taillard A., Jin M., Wakelam V., Vasyunin A. I., Caselli P., Pendleton Y. J., Dartois E., Noble J. A., Viti S., **Borshcheva K.**, Garrod R. T., Lamberts T., Fraser H., Melnick G., McClure M., Rocha W., Drozdovskaya M. N.,*

Lis D. C. Modelling methanol and hydride formation in the JWST Ice Age era // *Astron. and Astrophys* — 2025. — V. 695. — Pp. A247.

- [A3] *Punanova A. F., Borshcheva K., Fedoseev G. S., Caselli P., Wiebe D. S., Vasyunin A. I.* Correlation between formaldehyde and methanol in prestellar cores // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2025. — V. 537. — Pp. 3686-3700.
- [A4] *Borshcheva K., Fedoseev G., Punanova A. F., Caselli P., Jiménez-Serra I., Vasyunin A. I.* Formation of Complex Organic Molecules in Prestellar Cores: The Role of Nondiffusive Grain Chemistry // *Astrophys. J* — 2025. — V. 990. — Pp. 163.

Другие публикации автора по теме диссертации

- [B1] *Борщева Е. В., Вибе Д. З.* Астрохимические базы данных как источник неопределённости при моделировании // Научные труды Института астрономии РАН. — 2019. — Т. 4 — С. 61-66.
- [B2] *Борщева Е. В.* 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 [5].

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^+ [21, 22]. Результаты реализации этих цепочек могут наблюдаться и после завершения вспышки.

В работах [8] и [9] было проведено моделирование химических изменений в околосвёздном газопылевом веществе в условиях вспышек светимости флуоресценции, чтобы выявить возможные индикаторы вспышечной активности, длительное время после вспышки сохраняющие содержания,

нетипичные для спокойной фазы. В [8] в качестве подобных индикаторов были предложены органические соединения, в частности, метилформиат HCOOCH_3 , ацетонитрил CH_3CN , кетен CH_2CO , адсорбированный гидроксилламин iNH_2OH , 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 iC_6H_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 [9] в качестве индикатора произошедшей вспышки светимости, долго сохраняющего аномальные поствыспышечные содержания, был, в частности, предложен формальдегид H_2CO .

В обеих упомянутых работах [8, 9] использовалась двухфазная астрохимическая модель: отдельно рассматривались газ и вещество мантии пыли без дифференциации на поверхностные и глубинные слои. В такой постановке задачи не учитывается замедление диффузионных реакций, обусловленных тепловыми прыжками частиц, в толще ледяной мантии, что может привести к перепроизводству одних молекул и недостаточному производству других. Это было отмечено в работе [8]: 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 iCO и iCO_2 по отношению к iH_2O были равны 10^{-4} и 10^{-3} , соответственно. Это не вполне согласуется с наблюдательными данными. По результатам наблюдений протозвёздных объектов [23, 24] обилие адсорбированных CO и CO_2 по отношению к содержанию льда H_2O составляют порядка 10–30%, а содержание льда метанола (iCH_3OH) — всего 3–4%. Впрочем, в отдельных случаях наблюдаемое содержание льда метанола может составлять менее одного процента по отношению к водяному

льду [25] или превышать 10% [23].

В базовой модели из работы [8] 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 успевали конвертироваться в метанол, что решало проблему его избытка, но и содержание $i\text{CO}_2$ оказывалось 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 [8] 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 [8], в данной главе 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, стадия вспышки длительностью 100 лет и поствспышечная стадия.

Таблица 1.1. Физические условия в рассмотренных областях диска

Область диска, расстояние до звезды	Стадия	$n(\text{H}_2), \text{см}^{-3}$	T, K	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}

В отличие от работы [8], мы рассматриваем только тёмный диск, без атмосферы. Чтобы отследить основные тенденции в химической эволюции, 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 K (см. ниже). Эти наборы параметров (см. таблицу 1.1) взяты из работы [26] и условно соответствуют внутренней, промежуточной, внешней и экстремально внешней областям типичного протопланетного диска.

В этой главе используется одноточечная астрохимическая модель PRESTA, базирующаяся на сетке химических реакций ALCHEMIC [20], аналогичная той, что применялась в работе [8], где можно увидеть более подробное её описание. В отличие от [8] мы отдельно рассматриваем химические процессы на пыли, происходящие в толще ледяной мантии, и отдельно — процессы, которые идут в нескольких ближайших к поверхности слоях мантии. За основу взят формализм из работы [3].

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

рованных n_i^{sur} компонентов подчиняются соотношениям

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

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

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. Пылинки считаются монолитными, поэтому процесс адсорбции не рассматривается.

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}) [1,2]. 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, ко-

торый часто обозначают как $E_{\text{swap},i}$ (от “swapping” — обмен), и его энергии десорбции выбрано равным $E_{\text{swap},i} : E_{\text{des},i} = 0.7$ [3]. Поскольку 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 [1], 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, поверхностная концентрация которых в нашей модели принята равной $4 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$.

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, $\alpha_{\text{des}} = \min(n^{\text{bulk}}/n^{\text{sur}}, 1)$ [2]. Возможны и иные варианты выбора α_{des} ; так, в работе [1] принято $\alpha_{\text{des}} = \alpha_{\text{ads}}$. Различие между этими вариантами обсуждается в [2].

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 толщей мантии и поверхностью (диффузия), описанный в [3], 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 моделирования

1.3.1. Сравнение двух- и трёхфазной моделей на стадии облака

Моделирование начинается со стадии молекулярного облака, для которой выбран низкометаллический начальный химический состав [27]. Если произвести расчёт при помощи трёхфазной модели с теми же параметрами, что и в работе [8], 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, например, изменение параметров начальной стадии моделирования [8] или варьирование скоростей реакций, в которые вовлечён $i\text{CO}_2$ [28]. При моделировании эволюции облака в диапазоне температур 10–20 К и на временах до 10^6 лет нами было обнаружено, что наилучшее согласие с наблюдательными данными в трёхфазном случае достигается для температуры 16 К и длительности стадии молекулярного облака 2×10^5 лет. При таких условиях с использованием той же сетки астрохимических реакций, что и в [8], 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 [25]), именно эти параметры — температура молекулярного облака 16 К, длительность стадии молекулярного облака

2×10^5 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 значимо (см. рисунок 1.1). Так, при температуре 15 К через 2×10^5 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 в диссертационной работе 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 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 2×10^5 лет находится в пределах одного порядка. Заметим, что на временах больше 4×10^5 лет разница обилий $b\text{CO}$

в толще ледяной мантии при 15 К и 16 К составляет уже более порядка величины, и именно содержание bCO на этих временах вносит основной вклад в общее содержание iCO на пыли.

Для сравнения было проведено моделирование с использованием двухфазной модели, которая применялась в работе [8], при температуре 16 К до времени 2×10^5 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 4.1 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

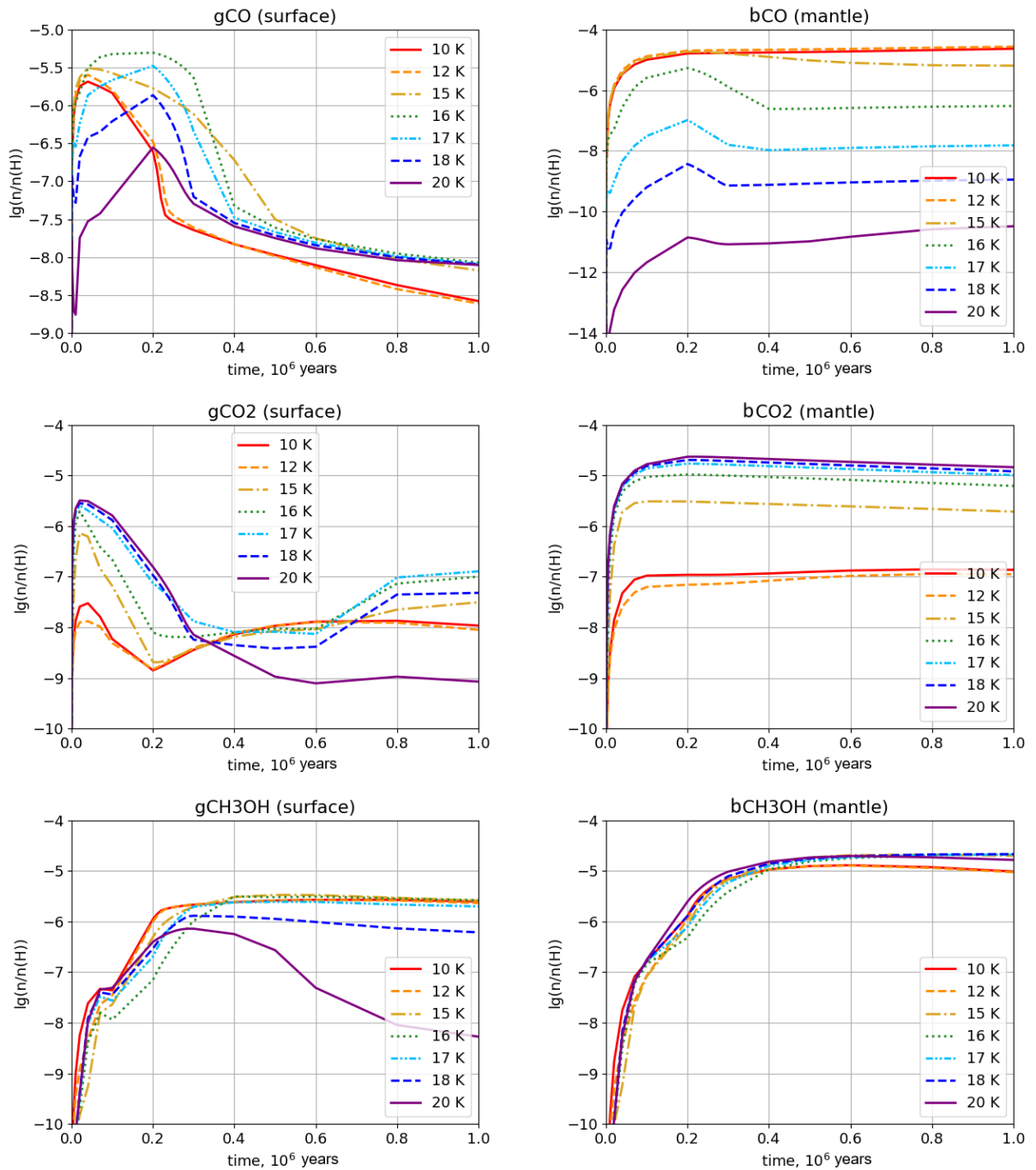


Рис. 1.1. Содержания некоторых из основных компонентов льда на стадии молекулярного облака для различных температур в трёхфазной модели.

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 таблице 4.2 Приложения 1 даны газофазные и избранные адсорбированные компоненты, различие содержаний которых в двух- и трёхфазной моделях превышает порядок величины. Потенциальными индикаторами вспышки светимости мы считаем соединения, содержания которых до и после вспышки (500 лет спустя) отличаются более чем на порядок. Отметим, что в данной главе индикаторами вспышки в равной степени называются как газофазные, так и адсорбированные компоненты, 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 [25] и только при специфической геометрии расположения протопланетного диска [29]. 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 (на расстоянии от звезды $R \sim 1$ а.е.), 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. 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.

Для более отдалённых областей протопланетного диска (на расстояниях от звезды $R > 10$ а.е.) характерна следующая картина: как на спокойной стадии, 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_xH_4 , 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_xH_4 на пыли эффективно разрушаются фотонами, индуцированными космическими лучами, 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 — gC_8H_4 и gC_9H_4 во внешнем диске и gC_9H_4 в экстремально внешнем диске.

В промежуточной и внешней областях протопланетного диска трёхфазная модель предлагает некоторое количество новых потенциальных ин-

дикаторов 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. В [8] 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 процессам десорбции с поверхности пыли, в том числе 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, индуцированными космическими лучами, 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 [30] молекул индикаторами вспышечной активности могут оказаться, к примеру, CS, CN, HCN в экстремально внешней области протопланетного диска. Их содержания спустя 500 лет после вспышки заметно выше довспышечных, 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

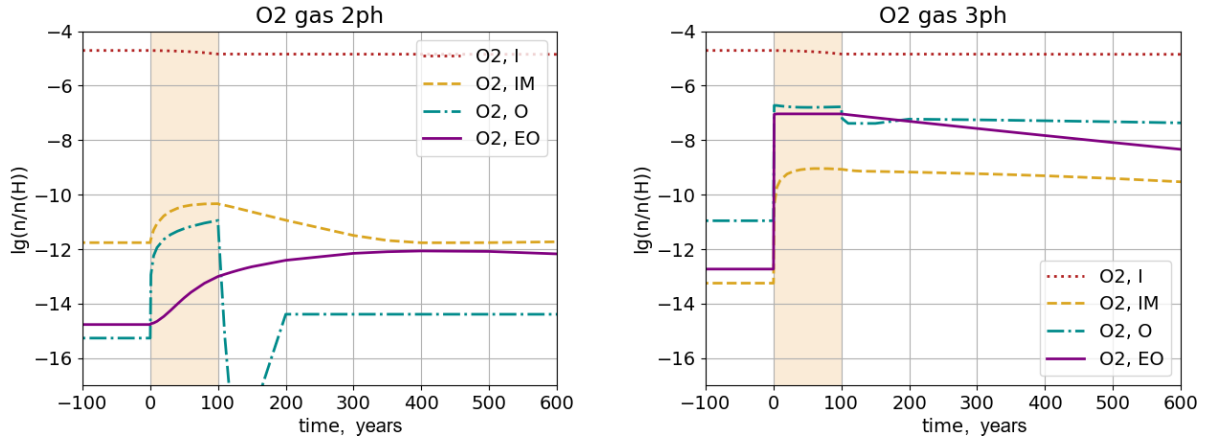


Рис. 1.2. O_2 как возможный индикатор вспышечной активности. Здесь и далее в Главе 1 на рисунках за нулевой момент времени принимается начало вспышки светимости.

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 довспышечным).

В работе [31] упоминались наблюдения изотопологов $НСО^+$ как неявных трейсеров снеговой линии воды в протопланетных дисках — присутствие большого количества молекул воды в газовой фазе уменьшает содержание изотопологов $НСО^+$. Действительно, при использовании трёхфазной модели во внутренней области протопланетного диска на спокойной стадии содержание $НСО^+$ достигает порядка 10^{-12} , с началом вспышки резко падает до 10^{-15} , в процессе вспышки практически не меняется, а после вспышки быстро возвращается к довспышечным значениям. Соответствующее понижение содержания изотопологов $НСО^+$ может быть выявлено в наблюдениях. Отметим, что в нашей модели изотопологи не рассматриваются, и в наборе химических соединений присутствует только обобщённая молекула $НСО^+$.

Далее рассмотрим некоторые компоненты, отмеченные как интересные в работе [8].

Адсорбированный бензол iC_6H_6 . В [8] было упомянуто, что бензоль-

ный 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 $C_6H_7^+ + NH_3 \rightarrow C_6H_6 + NH_4^+$ и $C_2H_4 + C_4H_3 \rightarrow H + C_6H_6$, а после вспышки — 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 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 $gH + gCH_2OH \rightarrow gCH_3OH$. После вспышки скорость данной реакции па-

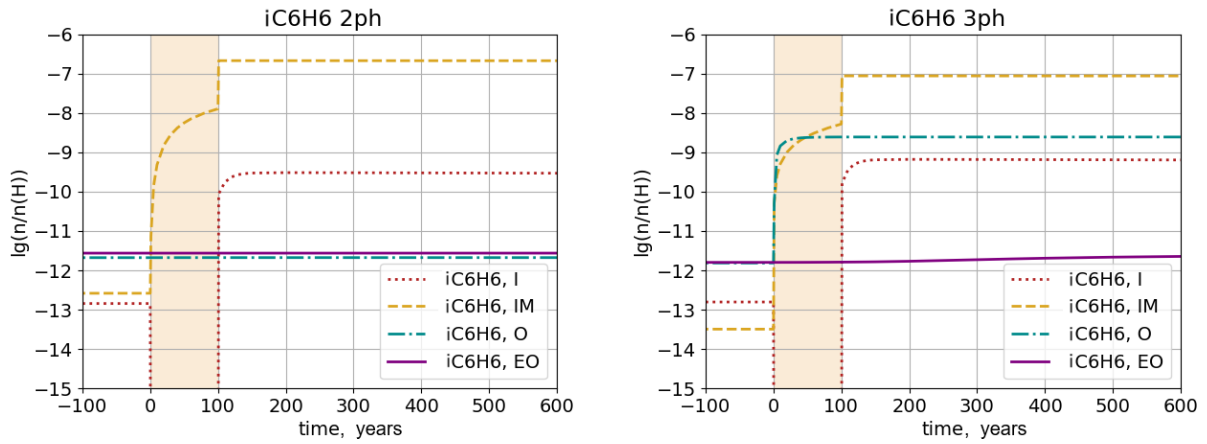


Рис. 1.3. Содержания льда C_6H_6 в двухфазной и трёхфазной моделях в различных областях протопланетного диска.

дает на несколько порядков, что наряду с разрушением CH_3OH фотонами, индуцированными космическими лучами, и при отсутствии других значимых источников метанола способствует возвращению его содержания к прежним значениям и даже падению ниже них. В отличие от работы [8], где содержание метанола в экстремально внешней области через 200 лет после вспышки в 50 раз превышает довыспышечное, в трёхфазном случае через 200 лет после вспышки содержание метанола уже несколько ниже довыспышечного, а через 500 лет после вспышки оно падает более чем на порядок величины по сравнению с довыспышечным. 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 во время и после вспышки в основном определяется процессами адсорбции и десорбции.

Оксиды углерода CO , CO_2 . В [8] отмечалось, что CO и CO_2 являются индикаторами произошедшей вспышки только в экстремально внешней

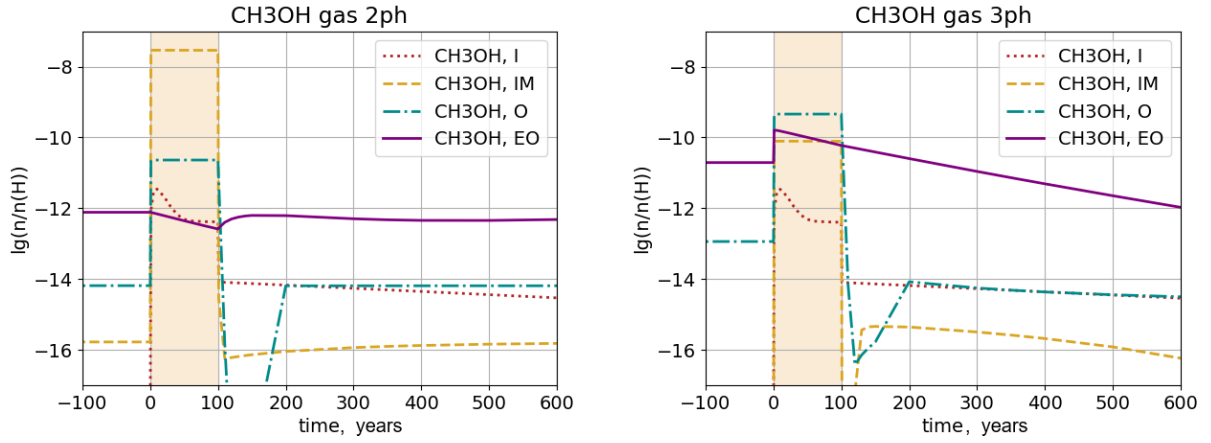


Рис. 1.4. Содержания CH_3OH в двухфазной и трёхфазной моделях для различных областей протопланетного диска.

области протопланетного диска. В нашей модели 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 CO_2 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 при этом через 500 лет после вспышки более чем на порядок ниже довспышечного (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

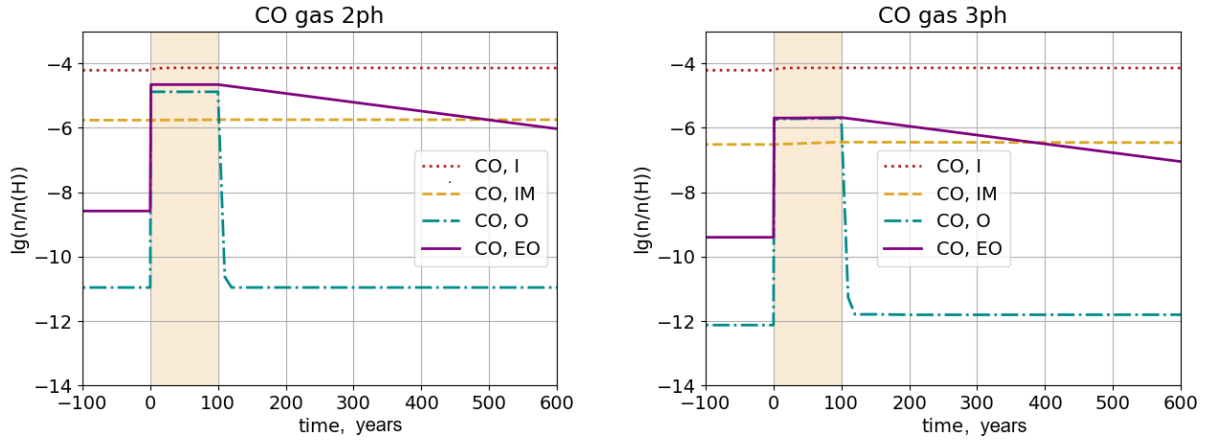


Рис. 1.5. Содержания CO в двухфазной и трёхфазной моделях в различных областях протопланетного диска.

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, индуцированными космическими лучами, 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, где его содержание во время вспышки почти не претерпевает изменений, оставаясь на уровне порядка 10^{-5} .

Адсорбированный гидроксилламин iNH_2OH . В работе [8] у адсорбированного гидроксилламина во внешнем диске оказалось наибольшее соотношение довспышечного и поствспышечного содержаний, которое составило порядка 10^{15} . В нашем исследовании во внутренней и промежуточ-

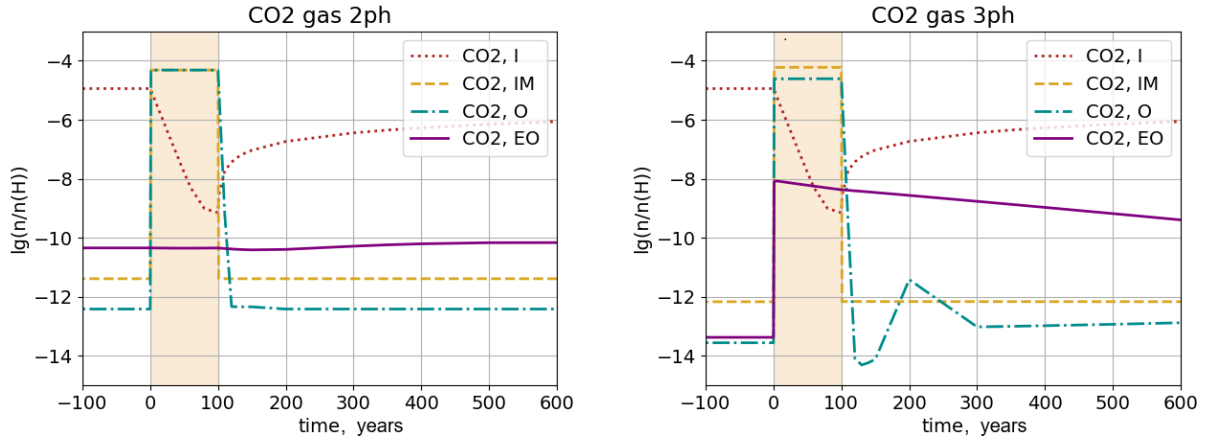


Рис. 1.6. Содержания CO_2 в двухфазной и трёхфазной моделях в различных областях протопланетного диска.

ной областях диска как в двухфазном, так и в трёхфазном случаях изменение содержания гидроксиламина 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 довыспышечными и достигают 10^{-7} во внешней области и 10^{-8} в экстремально внешней. Как и в [8], основным механизмом производства гидроксиламина на поверхности пыли оказывается реакция $\text{gOH} + \text{gNH}_2 \rightarrow \text{gNH}_2\text{OH}$, которая не была столь эффективной до вспышки из-за наличия достаточного количества атомарного водорода на пыли, использовавшегося в реакции синтеза аммиака $\text{gH} + \text{gNH}_2 \rightarrow \text{gNH}_3$. 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 гидроксиламина. Стоит отметить, что в упомянутых здесь случаях, как и в работе [8], довыспышечное содержание гидроксиламина на пыли близко к точности интегрирования уравнений химической кинетики, поэтому конкретное отношение до- и

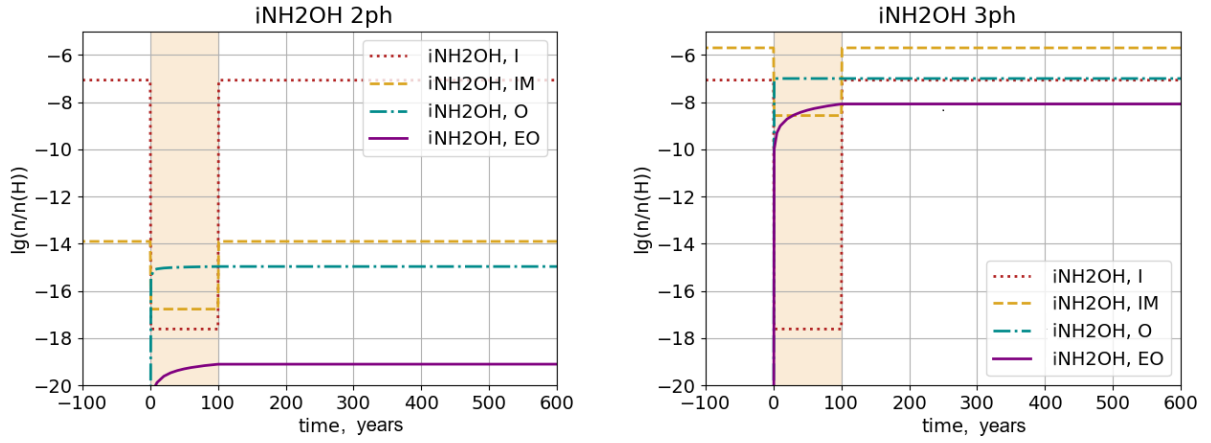


Рис. 1.7. Содержание льда NH_2OH в двухфазной и трёхфазной моделях в различных областях протопланетного диска.

послевспышечных содержаний физического значения не имеет. Но само обнаружение гидроксилamina 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 потенциальный индикатор вспышечной активности — формамид iNH_2CHO 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 в среднем на два порядка ниже, чем в трёхфазной. Основной путь производства формамида в обеих моделях — реакция $\text{gNH}_2 + \text{gHCO} \rightarrow \text{gNH}_2\text{CHO}$, 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 оказываются 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 2×10^5 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 [32] 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 [8]) и при 16 К на протяжении 2×10^5 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 2×10^5 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 СО, и единственный путь к его возвращению в атомарное состояние — реакция диссоциации СО фотонами, индуцированными космическими лучами, на поверхности пыли, которая недостаточно эффективна, чтобы обеспечить высокое содержание атомарного углерода.

Следует отметить, что и наши модели, и модели, используемые в [8] и [9], 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 (Н, H_2), и изменение содержаний химических соединений в мантии космической пы-

ли во многом обусловлено недиффузионными механизмами. Некоторые из важных недиффузионных механизмов описаны и промоделированы в [14]. 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 [8] 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 нашей работы и в модели [8] (напомним, что там молекулярное облако моделируется при 10 К на протяжении 10^6 лет). Например, в [8] метанол является индикатором вспышечной активности в экстремально внешней области, поскольку его содержание падает после вспышки достаточно медленно. Что касается нашей модели, в двухфазном случае метанол на вспышку почти не реагирует, а в трёхфазном его обилие после вспышки, напротив, снижается довольно быстро. Таким образом, в нашей работе индикатором вспышки оказывается меньшее содержание метанола по сравнению с его содержанием в спокойном протопланетном диске, а в работе [8] — большее.

Во внутренней области содержание CO_2 и в двухфазной, и в трёхфаз-

ной модели демонстрирует поведение, аналогичное тому, которое упоминалось в [8] (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 [8], и результаты данной главы 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 [8] и в нашей трёхфазной модели, однако в двухфазной модели индикатором в этой области он не является.

Такой значимый индикатор, как CO , и в нашей модели, и в [8] 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 [8], 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 [8] — например, в трёхфазной модели адсорбированный бензол оказывается индикатором не только в промежуточной и внутренней областях, как в [8], но и во внешней (а в двухфазной модели — только в промежуточной и внутренней, как и в [8]). Адсорбированный гидроксилламин в трёхфазной модели оказывается индикатором не только во внешней области, как у [8], но и в экстремально внешней. Молекулярный кислород в трёхфазной модели может служить индикатором всюду, кроме внутренней области (а в

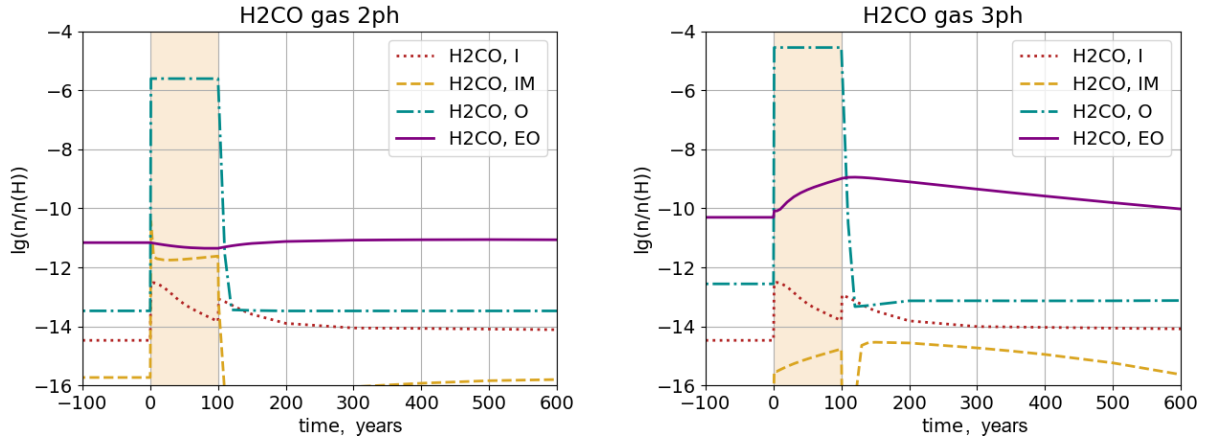


Рис. 1.8. Содержания H_2CO в двухфазной и трёхфазной моделях для различных областей протопланетного диска.

нашей двухфазной и в модели [8] — только в экстремально внешней). В нашей двухфазной модели по сравнению с трёхфазной и с [8] некоторые индикаторы исчезают — например, метанол, адсорбированный гидроксил-амин и диоксид углерода в экстремально внешней области диска.

Формальдегид H_2CO , упоминавшийся в [8] как индикатор вспышечной активности в экстремально внешней области, не оказывается индикатором ни в двухфазной, ни в трёхфазной моделях — его содержания в этой области до вспышки и спустя 500 лет после неё различаются не более чем на порядок. Интересно, что как потенциальный индикатор отмечают формальдегид и в работе [9], 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 [9] отмечается, что гидроксиламин 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 быстро оседает на пыль, отчего его обилие в газовой фазе сравнивается с довспышечным, которое было ниже выбранного нами предела 10^{-12} . В других модельных точках протопланетного диска содержание гидроксилamina 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 наших моделей NH_2OH в газовой фазе индикатором ранее произошедших вспышек не оказался. В работе [8] газофазный гидроксил-амин также не упоминается в числе индикаторов в тёмном диске, однако там он является индикатором в атмосфере во внешней области диска. В данной главе 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 [33] 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 отношения обилий составляют $i\text{H}_2\text{O} : i\text{CO} : i\text{CO}_2 : i\text{CH}_3\text{OH} = 100 : 27 : 3 : 14$, а после 2×10^5 лет $i\text{H}_2\text{O} : i\text{CO} : i\text{CO}_2 : i\text{CH}_3\text{OH} = 100 : 35 : 11 : 5$.

Если принять $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.3$ в трёхфазной модели, задать длительность стадии молекулярного облака равной 2×10^5 лет при температуре

10 K, а затем промоделировать вспышку светимости в вышеупомянутых областях протопланетного диска (с тем изменением, что в экстремально внешней области температура будет равна 10 K, как на стадии молекулярного облака и как в [8]), 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 CO 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 ацетилен C_2H_2 во внутренней области, этан C_2H_6 , атомарный азот N 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 K в основной модели и 10 K в модели с $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.3$.

Полный список потенциальных индикаторов вспышечной активности, которые в двух рассмотренных трёхфазных моделях не совпадают, можно найти в таблице 4.3 Приложения 1.

Необходимо также отметить, что энергии десорбции не обязаны быть одинаковыми для всех соединений на поверхности пыли (см., например, [34]). В Главе 2 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 содержаний основных углеродсодержащих компонентов льда ($i\text{CO}$, $i\text{CO}_2$, $i\text{CH}_3\text{OH}$) на стадии 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 довспышечной 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 [9] формальдегид H_2CO как потенциальный индикатор недавно произошедших вспышек светимости, однако здесь, в отличие от [8], 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 [8]. В обеих этих моделях потенциальные индикаторы в основном сосредоточены в экстремально внешней области протопланетного диска. Наша двухфазная модель, аналогичная модели [8], 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 [8] или наша трёхфазная модель.

1.6. Положение, выносимое на защиту по результатам Главы 1

- Исследован вклад реакций в адсорбированном веществе на формирование молекулярного состава дисков фуоров. Показано, что трёхфазная астрохимическая модель, в отличие от двухфазной, позволяет добиться близких к наблюдаемым содержаний основных углеродсодержащих компонентов ледяных мантий (CO , CO_2 , CH_3OH) на стадии молекулярного облака. Показано, что во внешних областях протопланетного диска трёхфазная модель предлагает большее количество потенциальных индикаторов произошедшей вспышки светимости, чем двухфазная.

Глава 2. Образование сложных органических молекул в дозвёздных ядрах: роль недиффузионной поверхностной химии

2.1. Введение

Одним из неожиданных астрохимических открытий оказалось обнаружение сложных органических молекул в холодных плотных ядрах молекулярных облаков. Вероятно, впервые о наличии СОМ в холодном тёмном облаке упоминалось в работе [35], 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 [36, 37]. За последнее десятилетие СОМ были обнаружены во многих холодных плотных ядрах на разных стадиях химической и динамической эволюции, которые определяются центральной плотностью ядер, профилем плотности газа и степенью фракционирования дейтерия [38, 39]. Попытки установить эволюционную последовательность холодных плотных ядер были предприняты в работе [40]. Наиболее динамически развитые холодные плотные ядра на грани формирования протозвезды называются дозвёздными ядрами. СОМ обнаружены, например, в достаточно молодых ядрах L1521E [41, 42] и L1517B [40], в более развитом ядре L1498 [43], а также в ядре L1544, которое считается дозвёздным ядром [44, 45]. Таким образом, можно утверждать, что СОМ повсеместно распространены в областях формирования маломассивных звёзд. Различный эволюционный статус, возможно, объясняет наблюдаемую разницу в содержаниях СОМ между ядрами.

Хотя СОМ были обнаружены во многих холодных плотных ядрах, их распределение внутри ядер остаётся неизвестным, за исключением рас-

пределения метанола. Метанол наиболее распространён в оболочке вокруг пика излучения пыли [46, 47]. Эту область часто называют пиком излучения метанола или “метанольным пиком”. В свою очередь, пик излучения пыли — или “пылевой пик” — соответствует области ядра с наибольшей плотностью газа. Согласно модели [48], в L1544 плотность газа на пылевом пике превышает 10^7 см^{-3} с поглощением в видимом диапазоне $A_V > 50^m$, в то время как метанольный пик характеризуется умеренной плотностью 10^5 см^{-3} и $A_V \approx 5^m$. Два пика находятся друг от друга на расстоянии приблизительно 4000 а.е. [47]. Наблюдения [44] выявили присутствие СОМ вблизи обоих пиков в L1544 с содержанием в 2–10 раз выше в области метанольного пика, чем в области пылевого пика.

За последние десятилетия было предложено несколько сценариев, объясняющих присутствие СОМ в холодном плотном молекулярном газе. Они основываются на воздействии частиц космических лучей, кинетике Элея–Ридеала, поверхностных реакциях вставки углерода (carbon insertion reactions) — см., например, [49–51]. Большинство предложенных сценариев можно разделить на два класса, опираясь на то, газофазная или поверхностная химия отвечает за образование СОМ. Первый предложенный сценарий [52] предполагал газофазное образование СОМ из прекурсоров, сформированных на поверхности пыли (метанол). Модель [52] и её расширенная версия [4] частично имели успех в объяснении наблюдаемых содержаний 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 него наблюдалось перепроизводство метанола в газовой фазе. Во-вторых, при применении к другим, предположительно менее проэволюционировавшим холодным плотным ядрам, модель не воспроизводила наблюдаемые содержания СОМ [42]. Наконец, модель [4] не смогла воспроизвести достаточные содержания CO_2 во льду для статичного профиля физических условий в ядре L1544, взятого

из [48]. В данном профиле температура пыли в центре ядра опускается ниже 10 K, а на его внешнем крае достигает приблизительно 15 K. Согласно [23] и [25], CO_2 — один из главных компонентов ледяных мантий с содержанием 20% по отношению к водяному льду (хотя не вполне ясно, сохраняются ли такие обилия во внутренних областях холодных плотных ядер). Похожее отношение содержаний льда CO_2 и водяного льда (10–20%) в тёмных межзвёздных облаках было обнаружено и в ходе выполнения программы Ice Age [53, 54].

В настоящее время считается, что важную роль в синтезе межзвёздных сложных органических молекул играют процессы, происходящие в адсорбированном веществе [55]. Однако в традиционном варианте диффузионной химии это предположение сталкивается с трудностями. Частицы тяжелее атомарного и молекулярного водорода при низких температурах, характерных для внутренних областей холодных плотных ядер (< 10 K), практически неподвижны, поэтому скорости диффузионных реакций между ними пренебрежимо малы.

Результаты моделирования из работы [14], основанной на экспериментальных данных [15, 17], подтверждают, что поверхностная химия может играть ключевую роль в образовании СОМ в холодном плотном молекулярном газе. Химические реакции между радикалами, ведущие к образованию СОМ, способны эффективно идти при температурах около 10 K, поскольку в некоторых случаях радикалы-реагенты оказываются на пылевых частицах близко друг к другу как продукты других процессов, эффективных при 10 K. 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 [14]. Эти авторы исследовали роль недиффузионной химии в образовании СОМ в дозвёздном ядре L1544 [14], а также в

формировании ледяных мантий межзвёздных пылинок в протозвезде класса 0 Cha-MMS1 [56] и в образовании СОМ в горячих ядрах [57]. 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 [14] имеются сложности в воспроизведении наблюдательно полученных [44] радиальных профилей метанола и других СОМ. Авторы [14] также сделали вывод о незначительном вкладе газофазной химии в образование СОМ в дозвёздном ядре L1544. Это контрастирует с более ранней работой [4], где утверждалось, что газофазные реакции играют важную роль в образовании СОМ в этом же дозвёздном ядре.

Значимым 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 [4] использована параметризация РД, предложенная в [58] на основе новаторской серии экспериментов [59, 60]. Выражение для эффективности РД (то есть для доли продуктов реакции, которая отправится в газовую фазу), предложенное в [58], предсказывает широкий диапазон эффективности для различных поверхностных реакций, включая в некоторых случаях значения 5% и выше. Например, перепроизводство газофазного формальдегида в работе [4], возможно, связано с высокой эффективностью РД для CH_3 и самого H_2CO . Большое содержание газофазных O_2 и H_2O обусловлено экстремально высокой эффективностью РД ($> 60\%$) в поверхностной реакции $\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{O}_2$. Некоторые другие соединения, например H_2S , в модели [4] также имеют каналы образования в твёрдой фазе с высокой эффективностью РД ($> 10\%$).

Кроме параметризации РД, предлагавшейся в [58], существуют и другие её параметризации — см., например, [52, 61, 62]. При этом в более поздних работах [63–66] сообщается, что уровень РД в среднем ниже, а разброс значений её эффективности не столь широк, как предложено в [58]. Оценка эффективности РД варьируется в диапазоне 1–3%.

Вышеупомянутые работы расширили наши представления об РД и продемонстрировали повсеместную распространённость этого явления, а 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, например, описанную Р. Гэрродом с соавторами [61], что и сделано в данной главе. Интересно, что РД оказывается ключевым механизмом независимо от того, газофазная или поверхностная химия отвечает за образование СОМ в холодных плотных ядрах. В первом случае РД 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 процесса.

В данной главе исследуется влияние недиффузионных химических реакций 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. Также мы обновили сетку астрохимических реакций с учётом новейших лабораторных и теоретических исследований. 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 [4]. Это позволяет сравнить новые результаты с полученными

ми в [4] и таким образом пересмотреть роль газофазных и поверхностных химических процессов в образовании СОМ в дозвёздных ядрах.

2.2. Описание модели

2.2.1. Трёхфазный код с недиффузионной химией

Астрохимическая модель, которая использовалась в данной главе, основана на трёхфазном коде MONACO, описанном в [4], 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 нами было внедрено несколько важных дополнений. Среди них недиффузионная химия на поверхности и в толще ледяной мантии, зависимость энергий связи для 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: частицы либо прореагируют, либо отдалятся друг от друга посредством диффузии. Как и в других аналогичных моделях (в том числе, в модели из Главы 1), газофазные уравнения химической кинетики даются выражением (1.1).

В модель включены следующие процессы десорбции: тепловое испарение; десорбция, индуцированная космическими лучами [67]; фотодесорбция при поглощении фотонов, индуцированных космическими лучами [68]; фотодесорбция и реактивная десорбция. Выход фотодесорбции на поглощённый фотон составляет 10^{-5} частиц для всех компонентов, кроме СО [69, 70]. Для монооксида углерода взято значение 10^{-2} [71]. Более детально влияние выхода фотодесорбции на результаты моделирования обсуждается в [72].

Химические процессы в поверхностных слоях ледяной мантии пылинок и в её толще задаётся уравнениями (1.5) и (1.6). В третьем слагаемом

(1.5) и (1.6), описывающем тепловую диффузию материала между поверхностными слоями и толщиной льда, использовано базовое выражение, приведённое в [3], хотя существует и более детально разработанный подход [73]. Однако при низкой температуре пыли, типичной для дозвёздных ядер, скорость подобной диффузии будет низка и не окажет существенного влияния на результат моделирования.

В данной главе 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 активными центрами связывания. Однако возможна ситуация, когда оба реагента оказываются близко друг к другу. Они могут быть продуктами предшествующих химических процессов или аккрецировать на пыль из газа. В этом 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 (1.5) и (1.6) могут быть описаны аналогично газофазным реакциям в уравнении (1.1) или же с использованием модифицированных уравнений химической кинетики [74, 75]. Недиффузионные реакции на поверхности и в толще льда представлены согласно подходу [14]. Выражение для скорости

недиффузионной химической реакции таково:

$$R_{AB} = f_{\text{act}}(AB)R_{\text{comp}}(A)\frac{N_B}{N_S} + f_{\text{act}}(AB)R_{\text{comp}}(B)\frac{N_A}{N_S}, \quad (2.1)$$

где $f_{\text{act}}(AB)$ — ограниченная барьером активации (при его наличии) эффективность реакции, вычисленная с учётом конкуренции реакция-диффузия, N_A и N_B — среднее число частиц каждого из реагентов на одной пылинке, N_S — среднее число активных центров связывания на поверхности 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:

$$R_{\text{comp}}(A, B) = \frac{1}{1/R_{\text{app}}(A, B) + t_{AB}}. \quad (2.2)$$

Здесь t_{AB} — временная шкала для любого события (прореагировать или разойтись в стороны), 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 компонента А или В, соответственно, то есть сумма скоростей всех процессов, которые доставляют реагент А или В на пылинку [14]. Такими процессами могут быть адсорбция из газа, фотореакции во льду, диффузионные реакции во льду и т.д.

В код MONACO были внедрены все типы недиффузионных химических процессов, описанных в [14], кроме трёхчастичных реакций с возбуждёнными реагентами (three-body excited reactions). Также мы предпочитаем именовать трёхчастичные реакции (three-body reactions) последовательными реакциями (sequential reactions), поскольку в химии термин “трёхчастичные реакции” может использоваться для иных типов процессов, и, на

наш взгляд, термин “последовательные” лучше отражает сущность недиффузионных реакций. Индивидуальное влияние каждого из недиффузионных механизмов, упомянутых в [14], описано в разделе 2.4.

Авторы [14] предлагают осуществлять три раунда недиффузионных последовательных реакций: на каждой итерации решения уравнений химической кинетики продукты предыдущего раунда могут сами вступать в недиффузионные последовательные реакции. 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 также было выбрано равным трём.

Как упоминалось выше, эффективность реакции $f_{\text{act}}(AB)$ для твердофазных процессов, обладающих активационным барьером, рассчитывается с учётом 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 отдалятся друг от друга. Результирующая вероятность реакции между частицами А и В, таким образом, составляет [2]:

$$f_{\text{act}}(AB) = \frac{\nu_{AB}\kappa_{AB}}{\nu_{AB}\kappa_{AB} + k_{\text{hop}}(A) + k_{\text{hop}}(B)}, \quad (2.3)$$

где ν_{AB} — наиболее высокая из вибрационных частот для компонентов А и В, κ_{AB} — вероятность того, что при встрече частиц реакция произойдёт [18], а $k_{\text{hop}}(A)$ и $k_{\text{hop}}(B)$ — скорости тепловой диффузии для А и В, соответственно [76].

В отличие от модели [4], в нашей модели молекулярному водороду позволяет аккрецировать на пыль. В самом деле, H_2 — наиболее обиль-

ный компонент в молекулярных облаках с содержанием в 10^4 раз выше, чем у второй по распространённости газофазной молекулы, оксида углерода CO (при отсутствии его вымораживания). Поэтому скорость адсорбции H_2 должна быть высока. Поскольку температура в тёмных областях дозвёздных ядер ниже 10 К (см., например, [48]), 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 , тогда как по данным наблюдений в подобных физических условиях мантии пылинок состоят преимущественно из водяного льда, а также льдов окиси и двуокиси углерода.

Чтобы избежать полного вымораживания H_2 при низких температурах, в нашей 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 [2]. Следуя работе [77], авторы [2] 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 [77] энергия связи с поверхностью из H_2 примерно в десять раз меньше, чем с поверхностью из CO, авторы [2] предложили выражение для изменяющейся во времени эффективной энергии десорбции:

$$E_{\text{des,eff}} = E_{\text{des}} (1 - \theta(H_2)) + 0.1 E_{\text{des}} \theta(H_2). \quad (2.4)$$

Здесь $\theta(H_2)$ — доля поверхности пылинки, покрытая молекулярным водородом. Таким образом, энергия связи химических соединений становится неявно зависящей от времени. В [2] с использованием выражения (2.4) корректировались энергии десорбции для всех соединений, 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 [78].

Диффузионная химия в глубинных слоях ледяных мантий также трактуется аналогично [4], за исключением химических реакций с атомарным и молекулярным водородом. В [4] предполагается, что все те диффузионные химические реакции, которые происходят на поверхности пыли, идут и в толще льда благодаря процессу диффузионного обмена (“swapping”). Скорость обмена рассчитывалась аналогично скорости тепловой диффузии, но в предположении, что энергетический барьер для прыжков частицы в толще мантии вдвое выше, чем её энергия связи на поверхности. В данной главе этот подход сохраняется, однако предполагается, что барьер для прыжков H и H_2 лишь в полтора раза выше, чем их энергия связи на поверхности. Атомы и молекулы водорода геометрически меньше других частиц, что способно привести к их более высокой мобильности в толще ледяной мантии по сравнению с другими частицами.

Вероятность для атомов водорода прилипнуть к поверхности пылинки при столкновении вычисляется согласно [79] и зависит от температуры пыли. Коэффициенты прилипания для остальных компонентов приняты равными единице (см., например, [80]). Другие возможные значения коэффициентов прилипания и их влияние на результаты моделирования обсуждаются в разделе 2.4.3.

Химические процессы на поверхности и в толще льда, индуцированные космическими лучами и ультрафиолетовыми фотонами, описываются так же, как в газовой фазе. Сечения взаимодействия фото процессов на поверхности равны соответствующим сечениям взаимодействия в газовой фазе. Заметим, однако, что скорости фотодиссоциации во льду могут быть меньше, чем в газовой фазе (например, [81–83]). Радиолиз межзвёздных

льдов и их лабораторных аналогов интенсивно изучается в последние годы [50, 84–88]. Результаты этих работ предполагают, что влияние космических лучей на химию межзвёздных льдов сложнее, чем описано в нашей модели. С другой стороны, авторы [85], которые исследовали образование OCN^- при воздействии космических лучей на аналоги межзвёздных льдов, содержащих N_2 и NH_3 , утверждают, что в плотных тёмных облаках значительные изменения состава льдов под воздействием космических лучей требуют времён порядка 10^6 – 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 настоящей работы.

2.2.2. Физический профиль ядра L1544, начальные условия и параметры химической модели

Физическая модель дозвёздного ядра L1544 и начальные условия подобны тем, что использовались в [4]. В частности, моделирование проводится для статичного одномерного радиального профиля плотности газа, температуры газа и пыли, полученного в [48] и подтверждённого в [45, 89] (рисунок 2.1). Ядро L1544 погружено в молекулярное облако [90], поэтому поглощение в оптическом диапазоне на его краю в нашей модели составляет 2^m . 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 для УФ-излучения облака спустя 10^6 лет эволюции. Полупрозрачное облако в нашей модели характеризуется плотностью газа 10^3 см^{-3} и поглощением в оптическом диапазоне $A_V = 2^m$. В течение 10^6 лет эволюции температуры газа и пыли в облаке линейно падают с 15 К до 10 К. Для стадии полупрозрачного облака в качестве начальных

выбраны атомарные “низкометаллические” содержания EA1, перечисленные в таблице 1 из [91]. 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, [18]), отчего скорость диффузии частиц оказывается естественным лимитирующим 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 нашей модели предполагается, что все частицы диффундируют по поверхности и внутри толщи мантии исключительно посредством тепловых прыжков. Всё ещё остаётся спорным вопрос, какова роль квантового туннелирования в диффузии атомарного и молекулярного водорода при низких температурах (например, [92–95]). Однако вероятно, что перемещение атомов H по поверхности из аморфного водяного льда происходит намного медленнее, чем предсказано простыми моделями туннелирования через прямоугольные потенциальные барьеры [18], даже если квантовое туннелирование сквозь барьеры диффузии действительно вносит вклад в его скорость наряду с тепловой диффузией [96,97]. Таким образом, в настоящей модели было решено рассматривать только тепловую диффузию H и H₂. Квантовое туннелирование сквозь барьеры реакций включено; предполагается, что эти барьеры прямоугольные и для большинства реакций имеют ширину 1 Å. Некоторые реакции, вовлечённые в цепочку гидрирования CO, имеют иную ширину барьера (см. раздел 2.2.3).

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-

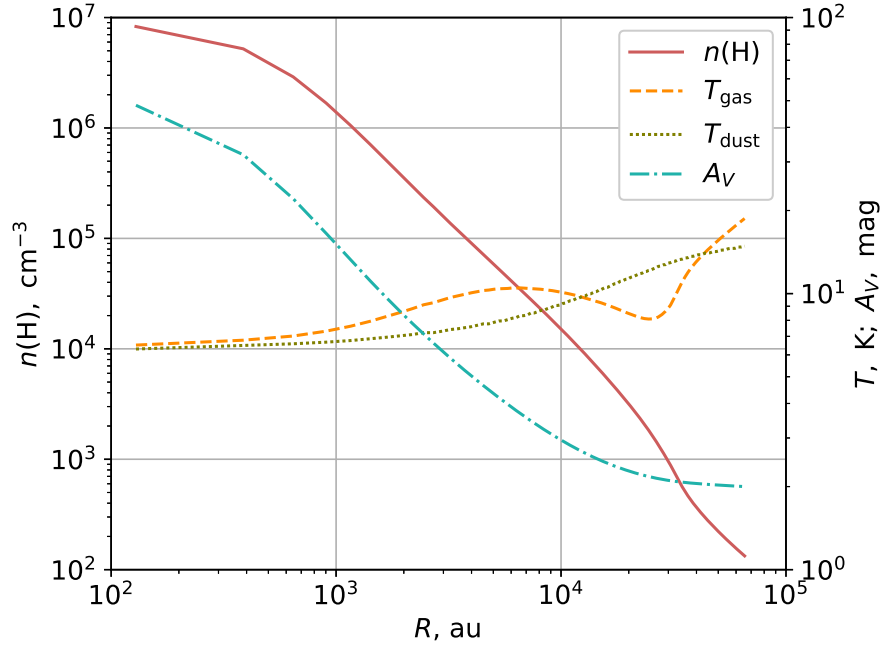


Рис. 2.1. Радиальные профили физических условий в дозвёздном ядре L1544 [48]. Температура пыли во внутренних областях ядра ниже 10 K, плотность газа порядка 10^7 cm^{-3} .

ствует фундаментальных физических аргументов в пользу универсальности значения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ для всех адсорбированных соединений [34]. С учётом этого, а также результатов [58] и [33], 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. Отметим, что в [65] говорится о широком диапазоне отношений энергии диффузии к энергии десорбции (0.2–0.7) в зависимости от исследуемого химического соединения. В разделе 2.3.5 обсуждается, как изменение этих параметров влияет на результаты моделирования.

В данной главе сравниваются две модели с различной параметризацией реактивной десорбции (РД). Первая основана на RRK-теории (Райса–Рамспергера–Кесселя) и представлена в астрохимическом контексте в работах [61, 98]. Здесь и далее она упоминается как модель с десорбцией по Гэрроду или модель GRD. Значение параметра a в выражении (2) из [61] для вероятности РД взято равным 0.01. Другая рассмотренная нами параметризация РД основана на экспериментальных результатах [58] (здесь

и далее упоминается как модель с десорбцией по Миниссале или модель MRD). Эта параметризация применялась в работе [4] и недавно была обновлена в [99]. В настоящей работе она используется со значением эффективной массы элемента поверхности M , равным 100 а.е.м. Следует заметить, что для обоих вариантов РД веществу позволяет десорбировать только с той части поверхности пылинки, которая не покрыта водяным льдом, — согласно обсуждению из [4].

2.2.3. Обновления в сетке реакций

Сетка химических реакций, которая используется в нашей модели, преимущественно основана на сетке, представленной в [43]. 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 [14] (см. таблицу 2.1). 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 [100], и аналогичная ей реакция в толще мантии. Данная реакция была экспериментально подтверждена в работе [101].

Во-вторых, в нашей модели были обновлены способы образования других СОМ. Например, в качестве пути образования твердофазного ацетальдегида включена цепочка реакций, предложенная в [103] (см. рисунок 3 в указанной работе). Таблица 2.2 содержит реакции из этой цепочки. В работе [104] также сообщается, что лёд ацетальдегида, вероятно, может формироваться в условиях, близких к условиям межзвёздной среды, через последовательное гидрирование твердофазного кетена CH_2CO (при

Таблица 2.1. Реакции образования льда CH_3OH , ширины ($\text{\AA}$) и энергии (К) их барьеров активации. Параметры присоединения/абстракции H из [14].

Реакция	Барьер ($\text{\AA}$)	E_{act} , К
$\text{gH} + \text{gCO} \rightarrow \text{gHCO}$	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 [100]
$\text{gCH}_3\text{O} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH} + \text{gH}_2\text{CO}$	—	0
$\text{gC} + \text{gH}_2\text{O} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$	—	0 [102]

помощи туннелирования атомов водорода через барьеры реакций) и затем ацетил-радикала CH_3CO .

Другие модификации сетки реакций описаны в Приложении 2.

Энергии десорбции соединений, используемые в нашей модели, совпадают с принятыми в [43], за исключением энергий десорбции для молекулярного водорода H_2 и атомарного углерода C. Для H_2 дано значение энергии десорбции, равное 380 К, что ближе к новым оценкам, приведённым в [107]. Энергия связи атомарного углерода принята равной 10000 К [108], поскольку часть атомов углерода прикрепляется к поверхности из аморфного водяного льда посредством хемисорбции, а не физисорбции. В работе [107] 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, характер-

Таблица 2.2. Цепочка образования ацетальдегида на пыли. Значения энергии активации E_{act} приведены по [103], внутри даны ссылки на источники, упомянутые в [103].

Реакция	E_{act} , K
$\text{gC} + \text{gCO} \rightarrow \text{gCCO}$	0 [105]
$\text{gH} + \text{gCCO} \rightarrow \text{gHC}_2\text{O}$	0
$\text{gH} + \text{gHC}_2\text{O} \rightarrow \text{gCH}_2\text{CO}$	0
$\text{gH} + \text{gCH}_2\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CO}$	975 [106]
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CHO}$	0

ных для модели ядра L1544 (7–15 K), эти факторы в сочетании с соответственно скорректированными энергиями десорбции вносят крайне малые изменения в химию адсорбированных соединений, рассчитанную с использованием значений из [43].

Ключевые параметры используемой астрохимической модели суммированы в таблице 2.3.

2.3. Результаты моделирования

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 главе. Сначала он применяется для сравнения результатов модели с РД по Гэрроду [61] (сокращённо GRD) с наблюдаемыми содержаниями газофазных СОМ в L1544, а затем, в разделе 2.3.4, он используется для сравнения результатов модели с РД по Миниссале [58] (сокращённо MRD) с теми же наблюдениями.

Чтобы определить диапазон времени эволюции, в течение которого будет релевантным сравнение наблюдательных и модельных содержаний, степень вымораживания СО (CO depletion factor) в центре дозвёздного яд-

Таблица 2.3. Резюме параметров модели.

Параметр	Значение
Скорость ионизации космическими лучами (с^{-1})	1.3(−17)
Выход фотодесорбции для СО (частиц/фотон)	1.0(−2) ^[71]
Выход фотодесорбции для других компонентов (частиц/фотон)	1.0(−5) ^{[69], [70]}
Размер пылинки (см)	1.0(−5)
Отношение массы пыли к массе газа	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 ^[52]
Число раундов для последовательных недиффузионных реакций	3 ^[14]
Туннелирование сквозь барьеры диффузии	Выкл. ^[14]
Конкуренция реакция-диффузия	Вкл. ^[2]
Туннелирование сквозь барьеры реакций	Вкл.
Ширины барьеров реакции, Å (исключения: см. таблицу 2.1)	1.0

ра (то есть в области его пылевого пика) сравнивается с наблюдаемым значением, полученным в [109]. Согласно этим данным, СО испытывает значительное вымораживание в центральных областях ядра L1544: они оценивают наблюдаемую степень вымораживания СО как ≈ 10 в направлении на пылевой пик. 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 отношения лучевых концентраций СО и H_2 в нашей модели GRD; здесь и далее лучевая концентрация любого газофазного соединения свёрнута с одномерной функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа IRAM из наблюдений [44] с $\text{FWHM} = 26''$. Закрашенным прямоугольником показана область двукратной неопределённости для наблюдаемого содержания СО. В нашей модели наблюдаемый уровень вымораживания СО достигается в момент времени $\approx 1.2 \times 10^5$ лет. С учётом неопределённости наблюдательного значения допустимая степень вымораживания СО покрывает диапазон от $\approx 4.0 \times 10^4$ лет до $\approx 4.0 \times 10^5$ лет.

Для сравнения результатов моделирования с наблюдениями были построены карты согласия в 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 в направлении на пылевой пик, на правой панели — в направлении на богатую метанолом оболочку низкой плотности, обнаруженную авторами [47] на расстоянии ≈ 4000 а.е. от пылевого пика (“метанольный пик”). Преимущественный интерес вызывают те области фазового пространства, где модельные содержания всех газофазных соединений, используемых для сравнения, — CH_3OH , CH_3O , CH_3CHO , HCOOCH_3 , CH_3OCH_3 и NH_2CHO — находятся в согласии с наблюдениями. Под согласием понимается ситуация, когда модельные содержания в

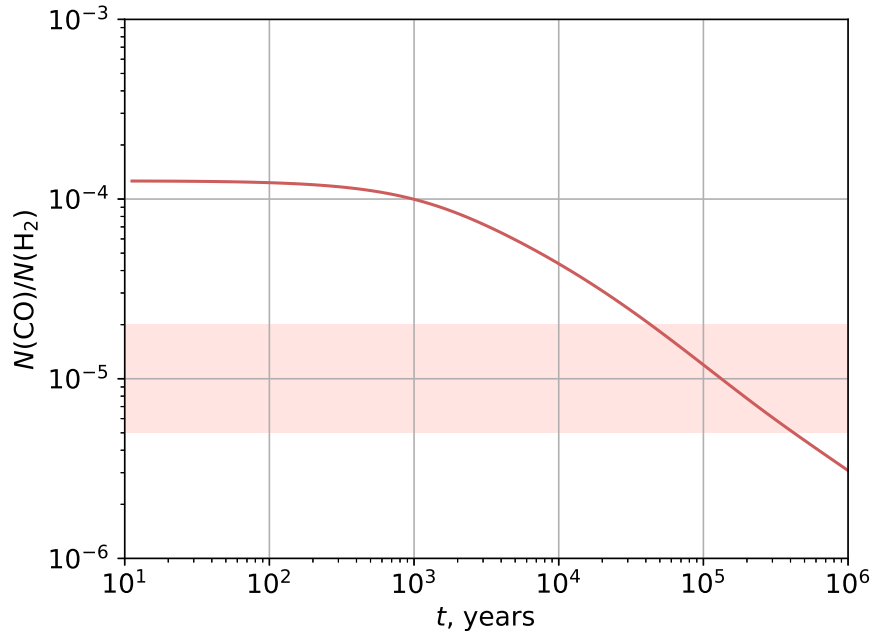


Рис. 2.2. Эволюция отношения модельных лучевых концентраций CO и H₂ в центре ядра. Закрашенным прямоугольником показана область двукратной неопределённости для наблюдаемого содержания CO [109].

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 содержания 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 [4]:

$$F(t, R) = \sum_{i=1}^6 \left(\frac{\lg \chi_{\text{obs}}(X_i) - \lg \chi_{\text{mod}}^{(t,R)}(X_i)}{\lg \chi_{\text{obs}}(X_i) + \lg \chi_{\text{mod}}^{(t,R)}(X_i)} \right)^2, \quad (2.5)$$

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 компонента X_i в точке (t, R) , полученное 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 $N_{\text{mod}}^{(t,R)}(X_i)$ — модельная лучевая концентрация X_i , свёрнутая с одномерной функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа с $\text{FWHM} = 26''$, а $N_{\text{mod}}^{(t,R)}(\text{H}_2)$ — свёрнутая с полушириной диаграммы направленности модельная лучевая концентрация H_2 .

На карте согласия для пылевого пика (левая панель на рисунке 2.3) минимальное значение функции $F(t, R)$ в модели GRD достигается на расстоянии 3700 а.е. от центра ядра на момент 3.9×10^5 лет. Эта точка во времени находится на границе временного интервала с допустимой степенью вымораживания CO. Минимальное значение $F(t, R)$ для метанольного пика достигается на 7600 а.е на момент 10^5 лет, когда уровень вымораживания CO согласуется с наблюдениями гораздо лучше (см. рисунок 2.2). При этом на момент 10^5 лет все рассматриваемые химические соединения демонстрируют модельные содержания в согласии с наблюдаемыми как в направлении на пылевой пик, так и в направлении на метанольный. Поэтому в настоящей модели 10^5 лет выбрано как время наилучшего согласия с наблюдательными данными. Заметим, что этот момент времени близок к моменту наилучшего согласия, полученному в [4], — там он равен 1.6×10^5 лет.

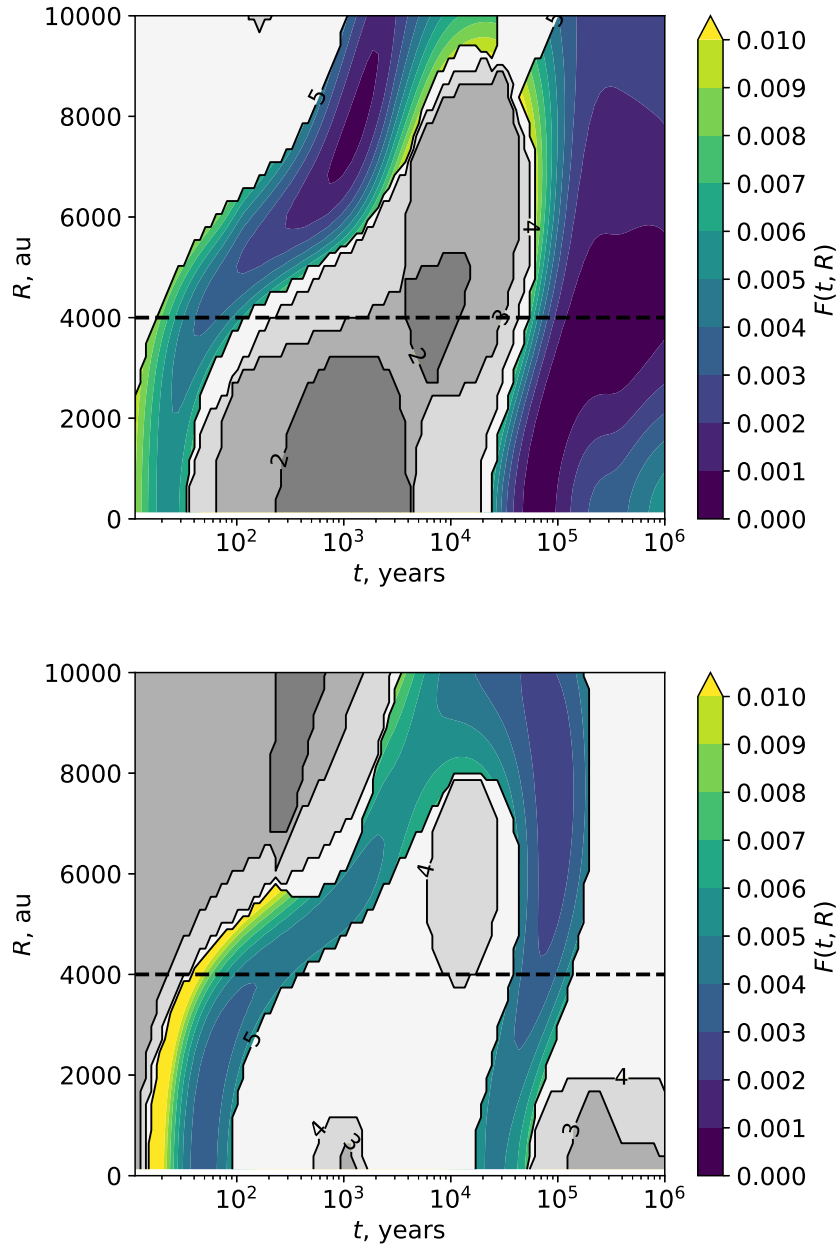


Рис. 2.3. Карты согласия для пылевого пика (слева) и метанольного пика (справа) в модели GRD. По оси ординат дано радиальное расстояние от центра ядра, по оси абсцисс — время эволюции в модели. Положение пылевого пика — 0 а.е. на оси ординат, положение метанольного пика соответствует 4000 а.е. и отмечено пунктирной горизонтальной линией. Серым закрашены области, где содержания ≤ 5 из исследуемых компонентов (CH_3OH , CH_3O , CH_3CHO , HCOOCH_3 , CH_3OCH_3 , NH_2CHO) согласуются с наблюдательными данными; числа указывают количество компонентов, содержания которых согласуются с наблюдениями внутри контурной линии. Область, где содержания всех исследуемых компонентов согласуются с наблюдениями, закрашена цветом. Чем выше значение $F(t, R)$, определенное в уравнении (2.5), тем хуже согласие с наблюдениями; 0.000 означает полное согласие. (Для модели MRD аналогичные карты согласия не показаны, поскольку не существует области (t, R) , где достигается согласие одновременно для всех исследуемых компонентов.)

2.3.2. Результаты для модели GRD

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), на момент наилучшего согласия с наблюдениями (10^5 лет). Дополнительно на рисунке 2.5 представлена эволюция содержаний газофазных молекул на временах, релевантных для астрохимического моделирования. В таблице 2.4 приведены модельные содержания на момент наилучшего согласия с наблюдениями и их сравнение с наблюдательными данными. В отличие от модели из работы [4], перепроизводства метанола не наблюдается. Их модельное содержание CH_3OH на метанольном пике (4000 а.е. от пылевого пика) было равно 2.7×10^{-8} , тогда как в нашей модели содержание CH_3OH на расстоянии 4000 а.е. от пылевого пика составляет 1.2×10^{-9} — что ближе к значению 3.9×10^{-9} , полученному авторами [110] посредством наблюдений на 3-метровом телескопе IRAM. Стоит отметить, что значение содержания метанола $\chi(\text{CH}_3\text{OH}) = 8.0 \times 10^{-9}$, использованное в [43], было получено в наблюдениях на интерферометре NOEMA с $\text{FWHM} \approx 5''$ [111]. Таким образом, не вполне уместно сравнивать этот результат с результатом, полученным для $\text{FWHM} = 26''$.

Отношения содержаний СОМ к метанолу в газовой фазе в нашей модели оказались существенно выше, чем в [4]. 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 (таблица 2.5). В работе [4] 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 [42] приводятся отношения наблюдаемых содержаний СОМ и метанола для дозвёздных ядер в диапазоне от нескольких

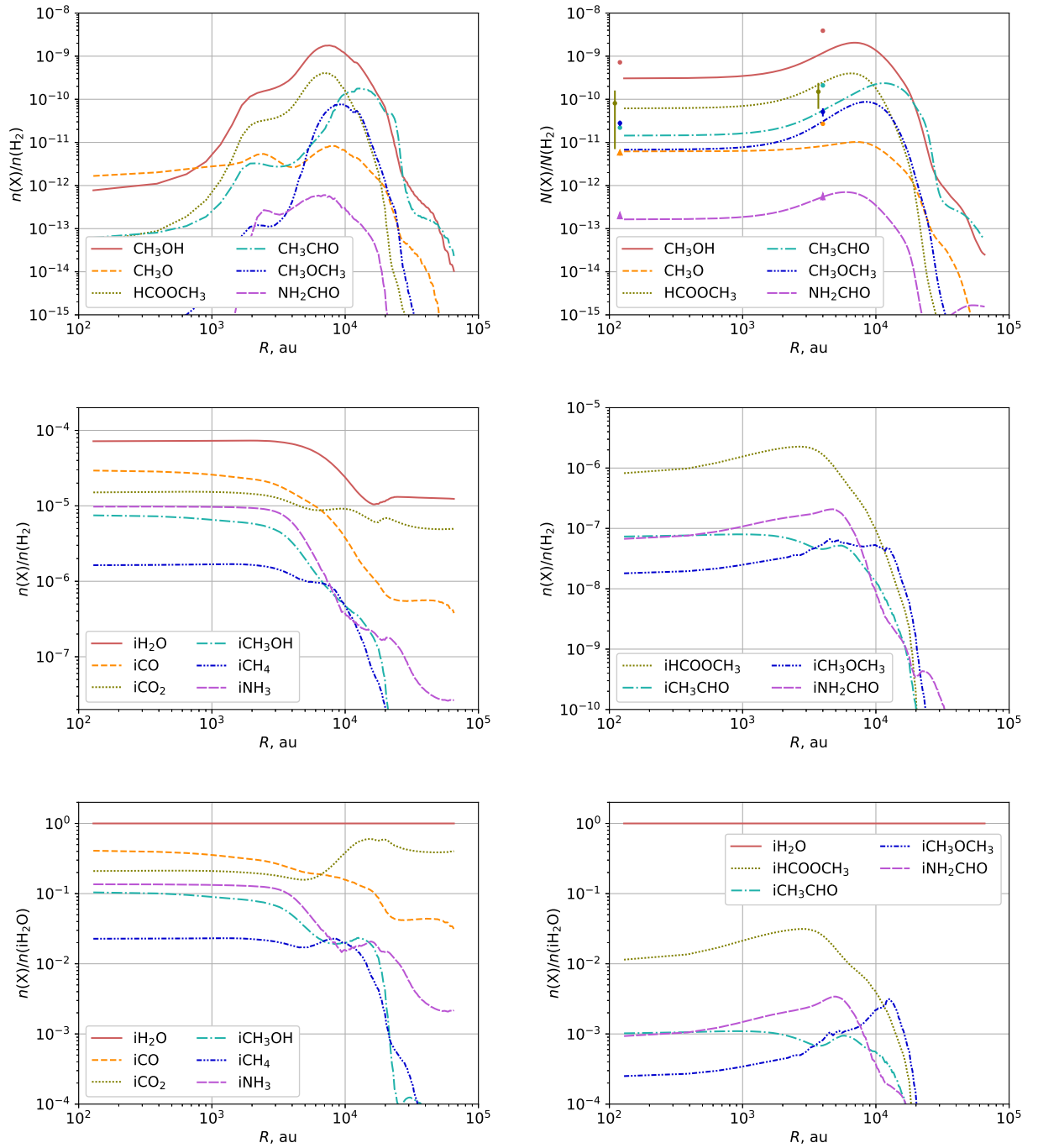


Рис. 2.4. Радиальные профили, полученные в модели GRD на момент наилучшего согласия с наблюдательными данными (10^5 лет). Вверху: профили модельных содержаний COM (слева) и отношений лучевых концентраций (справа). Лучевые концентрации свёрнуты с функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа с $\text{FWHM} = 26''$. 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 [110] (CH_3OH) и [44] (остальные компоненты), стрелками обозначены верхние пределы наблюдаемых содержаний, вертикальными линиями — ошибки наблюдений.

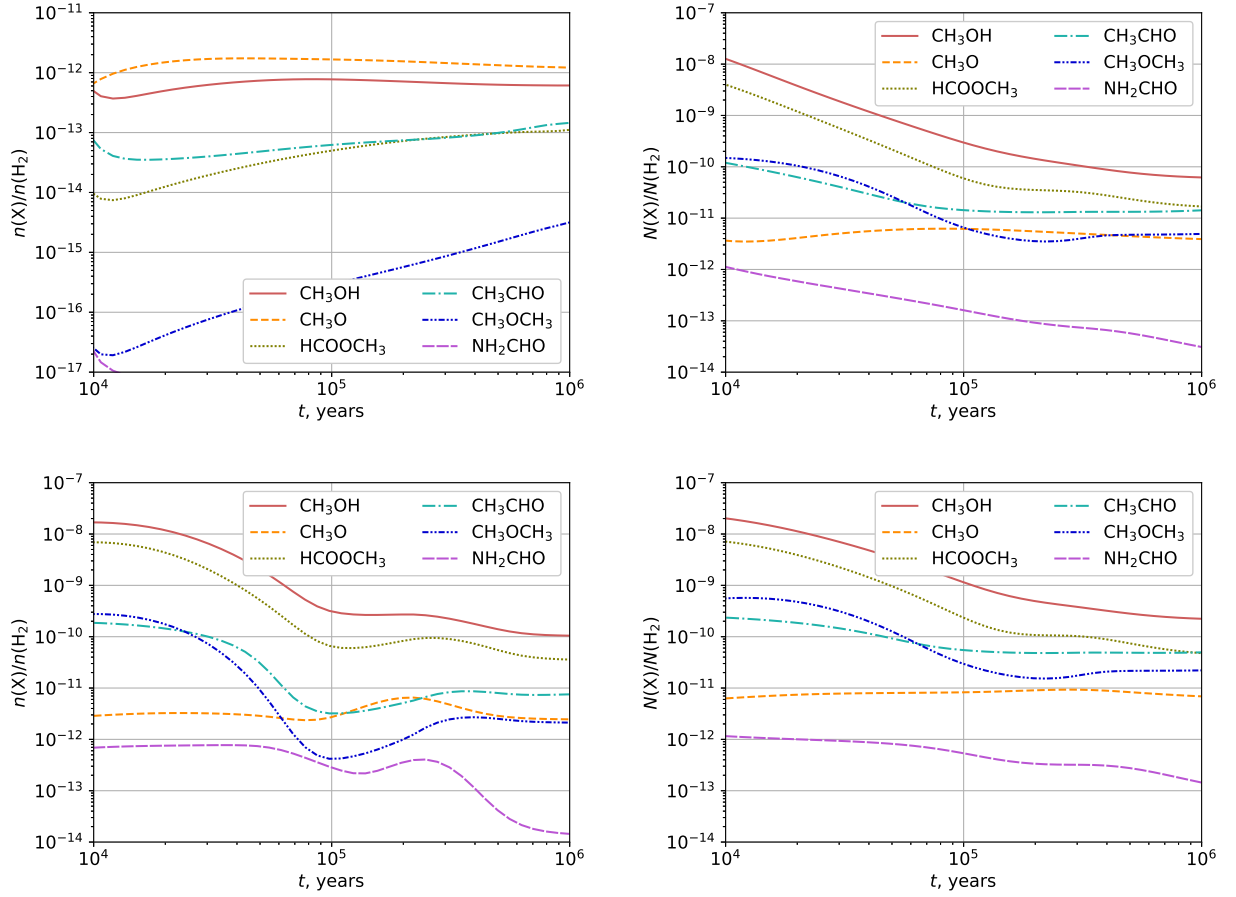


Рис. 2.5. Вверху: временные профили модельных содержаний (вверху слева) и содержаний, полученных как отношения модельных лучевых концентраций (вверху справа) для пылевого пика. Лучевые концентрации свёрнуты с функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа с $\text{FWHM} = 26''$. Внизу: то же, что и вверху, но для метанольного пика, 4000 а.е. от центра ядра.

Таблица 2.4. 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 лучевых концентраций. $N_{\text{obs}}(\text{CH}_3\text{OH})$ из работы [110]; $N_{\text{obs}}(\text{X})$ для остальных соединений, а также $N_{\text{obs}}(\text{H}_2)$ в направлении на пылевой пик ($5.4 \times 10^{22} \text{ см}^{-2}$) и на метанольный пик ($1.5 \times 10^{22} \text{ см}^{-2}$) — из [44].

Компонент	$\chi_{\text{obs}}(\text{X})$	$\chi_{\text{mod}}(\text{X})$
Пылевой пик		
CH_3OH	$(7.2 \pm 0.8) \times 10^{-10}$	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}
Метанольный пик		
CH_3OH	$(3.9 \pm 0.4) \times 10^{-9}$	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}

до 10% (см. рисунок 12 в упомянутой работе). Наша обновлённая модель лучше удовлетворяет этому диапазону. Расстояния от пылевого пика, на которых наблюдаются пики содержаний различных 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 напрямую связаны с метанолом (см. ниже).

В настоящей модели состав ледяных мантий межзвёздных пылинок для ядра L1544 отличается от состава, полученного в модели из работы [4], 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 2.6 даны обилия избранных молекул в

Таблица 2.5. Наблюдаемые и модельные отношения содержаний $\chi(X)/\chi(\text{CH}_3\text{OH})$ избранных СОМ к CH_3OH , %. Наблюдаемые содержания для CH_3OH взяты из [110], наблюдаемые содержания для остальных компонентов — из [44].

Компонент	Пылевой пик		Метанольный пик	
	Наблюдения	Модель	Наблюдения	Модель
CH_3CHO	3.1 ± 0.3	4.2	5.4 ± 0.6	4.2
CH_3OCH_3	3.9 ± 0.6	2.2	1.3 ± 0.3	2.6
HCOOCH_3	11.3 ± 10.3	20.0	3.8 ± 2.4	20.8

твёрдой фазе, их отношения к содержанию льда H_2O в процентах, а также рассчитанные лучевые концентрации $N(X)$ 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 вдвое меньше и далее падает по направлению к краю ядра. В отличие от модели из [4], 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 [4]. Его содержание наиболее высоко в центре ядра (около 10% от водяного льда), затем спадает по направлению к краю ядра, достигая 5% от содержания водяного льда на метанольном пике. Тем не менее, в нашей модели обилие 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 [23]). Но в работе [112] сообщается, что содержание метанольного льда в ядре L1544 составляет 11% по отношению к водяному льду, что согласуется с нашими результатами моделирования. Отметим, однако, что позиция звезды фона (Source 3), использованной для оценки обилия метанольного льда в [112], не совпадает ни с пылевым пиком, ни с метанольным пиком. 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 модельные 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 [4], 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 моно-слою 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 начальной стадии моделирования: в нашей модели используется “полупрозрачное облако” с концентрацией водорода 10^3 см^{-3} и температурой, линейно спадающей от 15 К до 10 К, тогда как в модели [4] было выбрано “диффузное облако” с меньшей численной плотностью газа (10^2 см^{-3}) и постоянной температурой 20 К. Поглощение в оптическом диапазоне в обоих случаях одинаково и составляет 2^m .

Содержание молекулярного водорода в поверхностных слоях ледяной мантии составляет $\sim 10\%$ от общего содержания поверхностного вещества в центральных областях ядра и снижается в направлении к краю ядра (рисунок 2.6). Высокое содержание молекулярного водорода обуславливает существенное изменение энергий десорбции Н и Н₂, что, в свою очередь, влияет как на поверхностную химию, так и на скорость РД. Благодаря

Таблица 2.6. Модельные содержания избранных компонентов льда и 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 $8.5 \times 10^{22} \text{ см}^{-2}$ в направлении на пылевой пик и $7.9 \times 10^{21} \text{ см}^{-2}$ в направлении на метанольный пик.

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

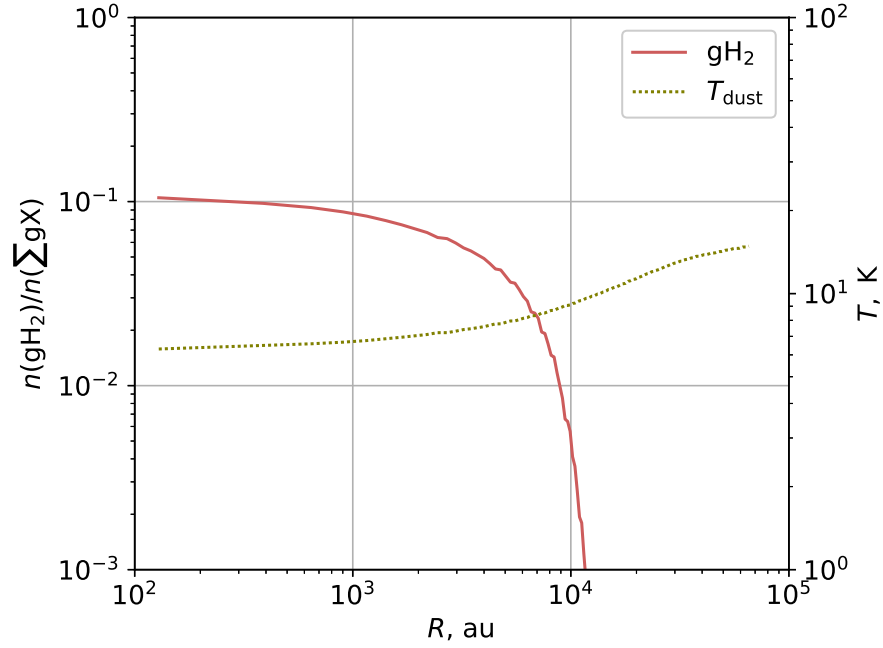


Рис. 2.6. Изменение доли молекулярного водорода в поверхностных слоях льда вдоль радиуса ядра. Её значение становится равновесным почти мгновенно и не испытывает существенных изменений за время моделирования. Для справки также приведён график изменения температуры пыли вдоль радиуса.

высокому содержанию gH_2 могут эффективно идти реакции с его участием. Как показано ниже, подобные реакции важны для формирования водяного льда и метана.

2.3.3. Химические процессы на метанольном пике в модели GRD

В данном разделе обсуждаются химические реакции на позиции метанольного пика, наблюдаемого на расстоянии 4000 а.е. относительно центра ядра L1544. Все значения приводятся на момент наилучшего согласия с наблюдениями для модели GRD (10^5 лет).

Важно отметить, что диффузионные реакции на поверхности пыли, эффективные при температурах около 10 К, — такие как гидрирование — также эффективны в недиффузионном режиме. Таким образом, недиффузионные механизмы эффективно ускоряют диффузионные реакции при низких температурах. К примеру, поверхностные реакции присоединения

водорода, в результате которых образуются метанол и другие СОМ, становятся примерно на 20% быстрее благодаря недиффузионным механизмам. Далее перейдём к описанию наиболее значимых путей формирования изучаемых СОМ (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 нашей 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 образовании 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 водорода выключена, поскольку многочисленные акты формирования и разрушения CH_3OH в конечном итоге увеличивают вероятность РД для его молекул. Это же 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 $\text{gC} + \text{gH}_2\text{O} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$ [102]. Однако её роль в производстве твердофазного формальдегида оказалась пренебрежимо мала — за исключением внешних областей ядра. Реакция также не влияет на обилие газофазного формальдегида. Заметим однако, что в условиях полупрозрачного облака, где доступно больше атомарного углерода, недиффузионная версия данной реакции производит большую часть gH_2CO на ранних временах эволюции полупрозрачного облака. В конце фазы полупрозрачного облака содержа-

ние льда H_2CO составляет $\sim 10^{-7}$, что примерно на порядок меньше одного монослоя льда.

Газофазные процессы отвечают за 10% производства метанола. Среди основных газофазных путей имеется диссоциативная рекомбинация протонированных и ионизованных молекул HCOOCH_3 и CH_3OCH_3 .

В L1544 пик содержания газофазного метанола находится примерно в 4000 а.е. от пылевого пика, где CO наиболее сильно выморожен. Согласно нашей модели, основной источник метанола в газовой фазе — РД льда метанола во время его образования на поверхности пылевых частиц. CH_3OH образуется путём последовательного гидрирования молекул CO, оседающих на пыль из газа, и гидрирование должно быть завершено, пока реагенты остаются в поверхностных слоях льда; как только они оказываются захороненными в толще ледяной мантии, РД прекращается. Таким образом, метанол, десорбирующий в газовую фазу, образуется в реакциях с участием молекул CO, которые лишь недавно аккрецировали на поверхность льда. Поэтому метанольный пик находится на таком расстоянии от центра ядра, где скорость адсорбции CO высока и атомарный водород на поверхности достаточно обилен, а не в области, где содержание CO максимально, но он скрыт в толще ледяной мантии.

HCOOCH_3 . Почти весь метилформиат производится на пыли. В газ он поступает благодаря РД. В нашей модели HCOOCH_3 — продукт поверхностной реакции $\text{gHCO} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gHCOOCH}_3$, которая идёт недиффузионно. Эффективность РД в ней составляет 0.02%. (Снова заметим, что эффективность РД в модели GRD рассчитывается согласно [61], а затем умножается на долю поверхности, не покрытую льдом H_2O , которая составляет 65% на момент 10^5 лет; её состав на позиции метанольного пика — 31% gCO и 15% gCO_2). Эффективность РД 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 нашей модели, их вклад в сравнении с образованием НСООСН_3 на пыли минимален. Реакция $\text{СН}_3\text{ОСН}_2 + \text{О} \rightarrow \text{НСООСН}_3 + \text{Н}$, внедрённая в астрохимическое моделирование в работе [12], обуславливает лишь 0.4% общей продукции НСООСН_3 в нашей модели. В работе [4] важным путём образования протонированного метилформиата была реакция $(\text{СН}_3\text{ОН})\text{Н}^+ + \text{НСООН} \rightarrow (\text{НСООСН}_3)\text{Н}^+ + \text{Н}_2\text{О}$. В нашей модели вклад данной реакции в образование метилформиата составляет лишь 0.1%.

$\text{СН}_3\text{ОСН}_3$. Диметиловый эфир в нашей модели производится в основном посредством двух каналов. Первый из них — реакция $\text{gСН}_3 + \text{gСН}_3\text{О} \rightarrow \text{gСН}_3\text{ОСН}_3$, которая идёт недиффузионно. Доля РД в ней составляет 0.03%. Однако петля присоединения/абстракции водорода ($\text{gСН}_3\text{ОСН}_3 + \text{gН} \rightarrow \text{gСН}_3\text{ОСН}_2 + \text{gН}_2$; $\text{gН} + \text{gСН}_3\text{ОСН}_2 \rightarrow \text{gСН}_3\text{ОСН}_3$) эффективно увеличивает это значение примерно в шесть раз. Второй канал — недиффузионная реакция $\text{gСН}_2 + \text{gСН}_3\text{О} \rightarrow \text{gСН}_3\text{ОСН}_2$ с последующим присоединением атома водорода. Таким образом, второй канал накладывается на упомянутую петлю присоединения/абстракции водорода, производя дополнительное количество радикала $\text{gСН}_3\text{ОСН}_2$. Поэтому реакция гидрирования $\text{gН} + \text{gСН}_3\text{ОСН}_2 \rightarrow \text{gСН}_3\text{ОСН}_3$ не просто входит в петлю (как это было в случае метилформиата), а частично отвечает за образование диметилового эфира. РД, 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 образования $\text{СН}_3\text{ОСН}_3$ — диссоциативная рекомбинация протонированного диметилового эфира $(\text{СН}_3\text{ОСН}_3)\text{Н}^+$, который, в свою очередь, образуется в реакции радиативной ассоциации $\text{СН}_3\text{ОН}$ и иона СН_3^+ , и нейтраль-

нейтральная реакция $\text{CH}_3\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_3$. Роль этих процессов существенно уменьшилась по сравнению с предыдущими работами. Образование протонированного диметилового эфира менее эффективно, чем в [4], поскольку содержание газофазного метанола в нашей модели существенно ниже в сравнении с этой работой. Для реакции $\text{CH}_3\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_3$ были взяты константы скорости, полученные методом “фазового пространства” в детальной работе [113], и её скорость стала на порядок ниже той, которая ранее использовалась в [12] и [4]. Поэтому роль данной реакции в образовании диметилового эфира соответственно уменьшилась.

CH_3CHO . В газовую фазу ацетальдегид также большей частью поставляется благодаря РД в поверхностных процессах. Наиболее продуктивна реакция $\text{gCH}_3 + \text{gHCO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CHO}$, которая идёт недиффузионно. Доля РД в ней составляет 0.1%. Петля присоединения/абстракции водорода ($\text{gH} + \text{gCH}_3\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CHO}$ и $\text{gH} + \text{gCH}_3\text{CHO} \rightarrow \text{gH}_2 + \text{gCH}_3\text{CO}$) на порядок усиливает перенос ацетальдегида с поверхности пыли в газ. Другой путь производства gCH_3CO и последующего образования gCH_3CHO (приблизительно 25% от общей продукции поверхностного ацетальдегида) — это цепочка $\text{gCO} \rightarrow \text{gCCO} \rightarrow \text{gHC}_2\text{O} \rightarrow \text{gCH}_2\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CHO}$, экспериментально подтверждённая в [103] (а также аналогичная цепочка реакций в толще мантии). Реакции присоединения водорода идут диффузионно и ускоряются благодаря аналогичным недиффузионным процессам. Доля РД для CH_3CHO , образуемого в конечной реакции данной цепочки, тоже составляет 0.1%. CCO производится в недиффузионной реакции $\text{gC} + \text{gCO} \rightarrow \text{gCCO}$. В толще мантии пыли недиффузионная реакция $\text{bO} + \text{bC}_2 \rightarrow \text{bCCO}$ также эффективна, хотя её скорость в четыре раза ниже, чем скорость реакции $\text{bC} + \text{bCO} \rightarrow \text{bCCO}$. На позиции метанольного пика bCH_2CO эффективно производится посредством фотодиссоциации этанолового льда фотонами, индуцированными космическими лучами.

В нашей модели 98% газофазного ацетальдегида получается благода-

ря РД в двух упомянутых выше реакциях производства CH_3CHO на пыли. Собственно газофазные процессы отвечают лишь за 2% продукции ацетальдегида в газе. Наиболее быстрый из них — диссоциативная рекомбинация протонированного ацетальдегида $(\text{CH}_3\text{CHO})\text{H}^+$, который образуется 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 примерно на порядок медленнее, чем диссоциативная рекомбинация $(\text{CH}_3\text{CHO})\text{H}^+$.

NH_2CHO . Газофазный путь образования формамида $\text{NH}_2 + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{NH}_2\text{CHO} + \text{H}$, упомянутый в базе астрохимических реакций OSU [114, 115], как было показано позже, неэффективен [116, 117]. 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 [118, 119]. В нашей модели эта поверхностная реакция является единственным источником формамида как в газе, так и на пыли. При низких температурах она идёт недиффузионно. Доля РД в ней составляет 0.02%.

Среди рассмотренных СОМ в нашей модели наиболее обильным во льду оказался метилформиат. Суммарная скорость недиффузионной реакции $\text{gHCO} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gHCOOCH}_3$ и её аналога в толще мантии, которые производят подавляющую часть льда HCOOCH_3 , в девять раз выше, чем суммарная 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 двадцать раз выше суммарной скорости недиффузионной реакции $\text{gCH}_3 + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OCH}_3$ и её аналога в толще мантии (производящих 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 10^{-14} у gCH_3 (7.7×10^{-7} у bCH_3) на момент времени 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 фо-

тём формирования gH_2O является диффузионная реакция $gH_2 + gOH \rightarrow gH_2O + gH$, которая отвечает за 84% производства воды на поверхности пыли в направлении метанольного пика [120]. Недиффузионные реакции абстракции водорода гидроксилом OH из соединений gH_2CO , $gHCO$, gCH_3O и gCH_2OH обуславливают 15% продукции 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 $gOH + gCO \rightarrow gCO_2 + gH$ (89% от общей его продукции). В нашей модели эта реакция — упрощённая репрезентация двухстадийного процесса $CO + OH \rightarrow HOCO$, $HOCO + H \rightarrow CO_2 + H_2$ (см. [121]). Данный канал остаётся важным даже на больших радиусах, и, несмотря на фотодиссоциацию, двуокись углерода сохраняет ненулевое содержание на краю ядра. Другой канал — недиффузионная реакция $gO + gHCO \rightarrow gCO_2 + gH$ (10%). Аналоги упомянутых реакций в толще ледяной мантии имеют скорости приблизительно в пять раз ниже, чем реакции в поверхностных слоях.

Источником gNH_3 оказывается диффузионная реакция $gH_2 + gNH_2 \rightarrow gNH_3 + gH$ (99% его продукции). Она имеет барьер активации ≈ 3000 К [122], однако она эффективна благодаря высокому содержанию H_2 на поверхности пыли и его квантовому туннелированию сквозь барьер активации. Безбарьерная реакция $gH + gNH_2 \rightarrow gNH_3$ оказывается неэффективной из-за низкого содержания атомарного водорода на поверхности в сравнении с молекулярным водородом.

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 $gH_2 + gCH_3 \rightarrow gCH_4 + gH$ (34% от общей продукции gCH_4). Его прекурсор gCH_3 производится в ре-

акции $gCH_2 + gH_2 \rightarrow gCH_3 + gH$. В свою очередь, главный путь образования gCH_2 — это реакция между молекулярным водородом и атомарным углеродом: $gC + gH_2 \rightarrow gCH_2$. Диффузионная и недиффузионная реакции $bH + bCH_3 \rightarrow bCH_4$ в толще мантии суммарно обладают скоростями, близкими к скорости вышеупомянутой поверхностной реакции образования gCH_4 .

2.3.4. Сравнение с моделью MRD

В предыдущем разделе были представлены результаты модели GRD, в которой применяется параметризация РД, основанная на RRK-теории и подробно описанная, например, в [61]. С другой стороны, в работе [4], где были воспроизведены наблюдаемые содержания COM, а также положение метанольного пика в ядре L1544, РД параметризована иначе, на основании лабораторных экспериментов [58]. 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 [123] — модель MRD.

Модель MRD была запущена с теми же параметрами, что и 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 не было достигнуто согласия с наблюдениями одновременно для всех исследуемых компонентов. 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, 10^5 лет.

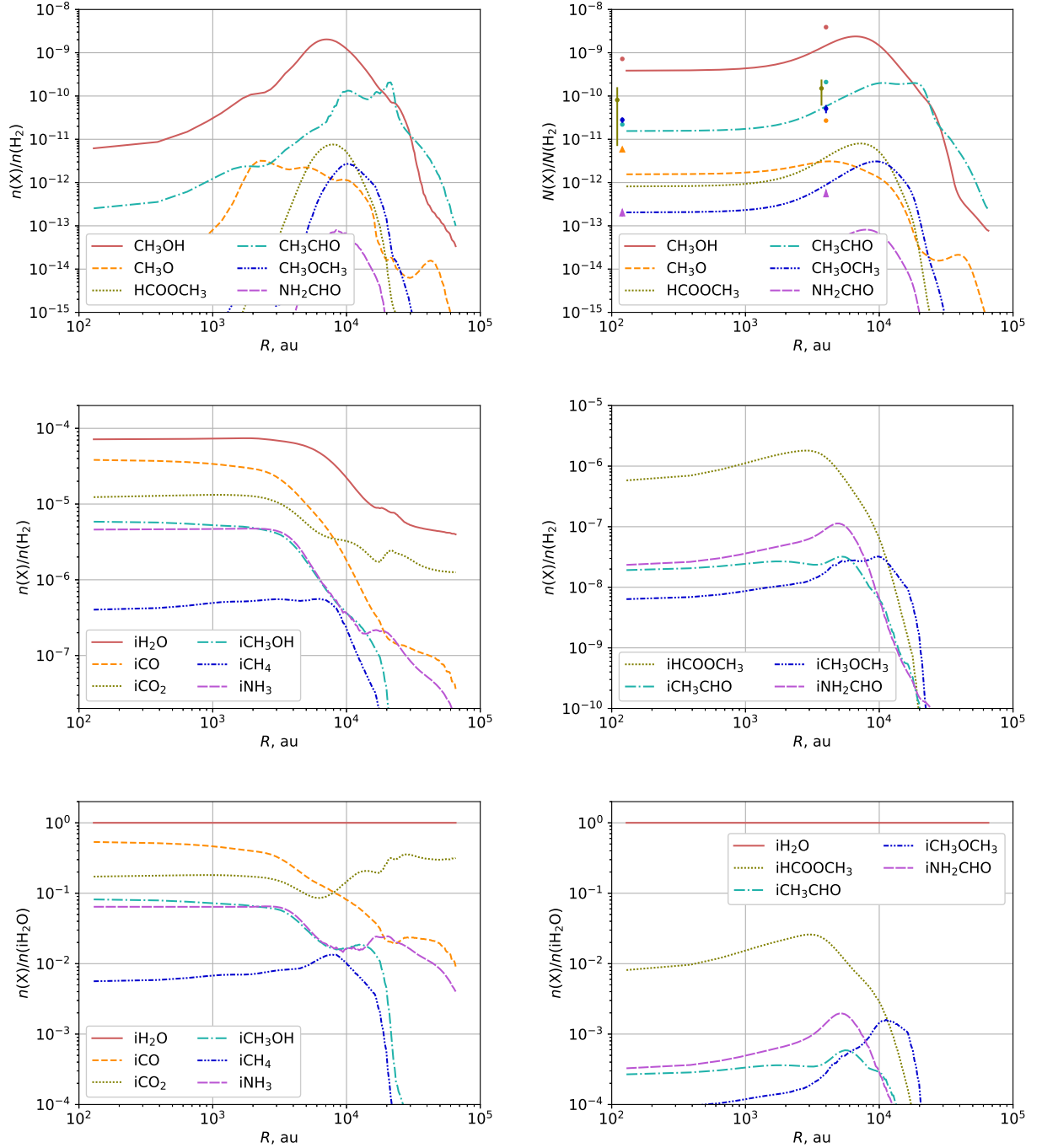


Рис. 2.8. Радиальные профили, полученные в модели MRD на момент 10^5 лет. Вверху: профили модельных содержаний COM (слева) и отношений лучевых концентраций (справа). Лучевые концентрации свёрнуты с функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа с $FWHM = 26''$. В центре: профили содержаний 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 [110] (CH_3OH) и [44] (остальные компоненты), стрелками обозначены верхние пределы наблюдаемых содержаний, вертикальными линиями — ошибки наблюдений.

Результаты для модели MRD представлены на рисунке 2.8. Содержания газофазных метилформиата и диметилового эфира оказались ниже наблюдаемых на один-два порядка величины (верхняя панель рисунка 2.8). Доля РД, рассчитанная согласно [123] для реакций $\text{gCH}_3 + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OCH}_3$ и $\text{gHCO} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gHCOOCH}_3$, очень низка – порядка 10^{-7} и 10^{-14} соответственно. Реакции присоединения водорода, в которых производятся эти СОМ, демонстрируют аналогичные эффективности РД. 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. При этом содержания ацетальдегида (CH_3CHO) в моделях GRD и MRD схожи, поскольку эффективности РД при образовании его на поверхности пыли в обеих моделях близки. Что касается формамида, доля РД в реакции $\text{gNH}_2 + \text{gHCO} \rightarrow \text{gNH}_2\text{CHO}$ в модели MRD пренебрежимо мала. Таким образом, при отсутствии эффективных газофазных путей образования, содержание формамида в газе в модели MRD оказывается ниже 10^{-13} . Эффективности RD для моделей GRD и MRD приведены в таблице 2.7. Приведённые расчётные значения RD умножены на долю поверхности, не покрытой льдом H_2O , — она составляет около 65% в модели GRD и 70% в модели MRD на позиции метанольного пика.

В отличие от газовой фазы, композиция льда не испытывает драматических изменений при замене параметризации РД. В центральных областях ядра изменения обилий всех исследуемых соединений во льду не превосходят порядка величины по сравнению с результатами модели GRD (рисунок 2.8, 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 вдвое по сравнению с моделью GRD. В частности, для gNH_2 РД в реакции его образования $\text{gH} + \text{gNH} \rightarrow \text{gNH}_2$ приблизительно в двадцать раз эффективнее в модели MRD, чем в модели GRD. При этом gNH_2 является прекурсором как для gNH_3 , так и для

Таблица 2.7. Эффективность реактивной десорбции (в % от общего производства продуктов реакции) для наиболее важных реакций образования COM в моделях GRD и MRD. В обоих случаях рассчитанные значения РД умножены на долю поверхности, не покрытой льдом H_2O .

Реакция	GRD, %	MRD, %
$\text{gCH}_2\text{OH} + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH}$	0.05	0.03
$\text{gCH}_3\text{O} + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH}$	0.06	0.04
$\text{gHCO} + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gHCOOCH}_3$	0.02	$\sim 10^{-12}$
$\text{gCH}_3\text{OCO} + \text{gH} \rightarrow \text{HCOOCH}_3$	0.02	$\sim 10^{-12}$
$\text{gCH}_3 + \text{gCH}_3\text{O} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OCH}_3$	0.03	$\sim 10^{-5}$
$\text{gCH}_3\text{OCH}_2 + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OCH}_3$	0.04	$\sim 10^{-4}$
$\text{gCH}_3 + \text{gHCO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CHO}$	0.1	0.05
$\text{gCH}_3\text{CO} + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_3\text{CHO}$	0.1	0.07
$\text{gNH}_2 + \text{gHCO} \rightarrow \text{gNH}_2\text{CHO}$	0.02	$\sim 10^{-6}$

gNH_2CHO . Таким образом, в модели MRD бóльшая доля gNH_2 уходит в газ благодаря РД, что обуславливает меньшие содержания аммиака и формамида во льду. Прекурсор gCH_4 , CH_3OCH_3 и gCH_3CHO — 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 РД в реакции его образования $\text{gH}_2 + \text{gC} \rightarrow \text{gCH}_2$ приблизительно в сорок раз слабее в модели GRD, чем в модели MRD. Таким образом, несмотря на малость доли РД 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. Эксперименты и модели предполагают множество различных значений для их отношения. Например, авторы [124] использовали в своих моделях $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.77$, а в работах [125] и [108] предполагается, что все соединения, включая Н и H_2 , диффундируют толь-

ко посредством тепловых прыжков, и при этом $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.4$.

Более подробные модели, опубликованные к настоящему времени, включают различные значения отношений энергий диффузии и десорбции для отдельных компонентов. Например, автор [126] обобщил энергии десорбции и диффузии для СО из ряда экспериментов и исследовал влияние соотношений $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$, варьирующихся в диапазоне 0.1–0.5 для СО и в диапазоне 0.3–0.5 для других компонентов, на результаты астрохимического моделирования. Он обнаружил, что модели с более высокими барьерами диффузии обеспечивают относительно лучшее согласие с наблюдательными данными по сравнению с моделями с более низкими барьерами. Авторы [127] не обнаружили чёткой связи между E_{diff} и E_{des} на поверхности из аморфного водяного льда. Согласно их исследованию, отношение $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ может варьироваться в диапазоне 0.2–0.7 в зависимости от химического соединения. Более того, энергия связи и, вероятно, диффузии частиц может также зависеть от степени покрытия поверхности компонентами (см., например, [128]). Наконец, на микроскопическом уровне каждый активный центр связывания характеризуется собственным значением энергии связи, и, следовательно, должно иметь место распределение энергии связи и диффузии на поверхности [129, 130]. Однако такой уровень детализации обычно не реализуется в моделях, основанных на уравнениях химической кинетики. В данной главе мы рассматриваем только два значения $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ для адсорбированных частиц: одно для атомов и другое для молекул.

Чтобы исследовать, насколько хорошо вычисления с различными $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ воспроизводят наблюдательные данные, было запущено два набора моделей, аналогичных MRD и GRD, где 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

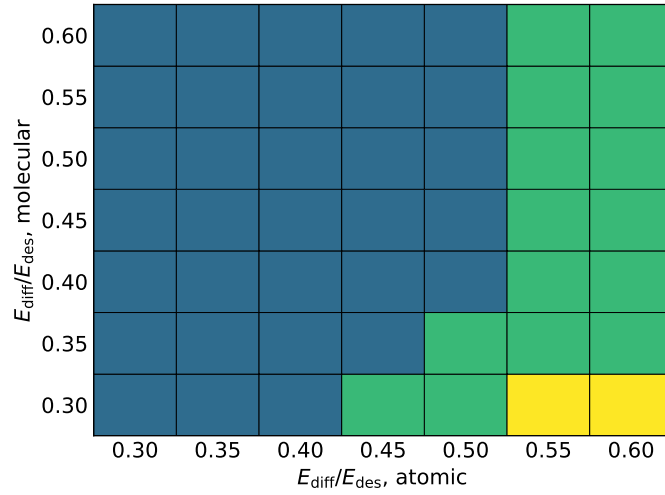


Рис. 2.9. Воспроизведение наблюдательных данных по газофазным СОМ в дозвёздном ядре L1544 моделями, аналогичными GRD, с разными $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$. Синий: модель не воспроизводит наблюдения; зелёный: недиффузионная модель GRD воспроизводит наблюдения; жёлтый: и недиффузионная, и диффузионная (с выключенными недиффузионными реакциями) модели воспроизводят наблюдения.

данные. Результаты моделирования для моделей GRD суммированы на рисунке 2.9. 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 диффузионная (т.е. с выключенными недиффузионными реакциями) модель типа 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 содержания всех шести исследуемых соединений находятся в согласии с наблюдениями как для пылевого пика, так и для метанольного.

Как видно из рисунка 2.9, значение $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ для атомарных ча-

стиц 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, мы считаем атомарное $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.5$ более приемлемым по сравнению с большими значениями.

В случае $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}} = 0.5$ для атомов состав льда (как основных его компонентов, так и СОМ) остаётся практически одинаковым при варьировании молекулярного $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$. В центральных областях ядра вариации содержаний на момент 10^5 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 $\approx 2.0 \times 10^4 - 4.0 \times 10^4$ лет, где газофазное содержание СО всё ещё выше, чем 2.0×10^{-5} , и потому наблюдаемая степень вымораживания СО (с учётом погрешности наблюдений) 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 результатов

В данной главе одновременно воспроизведены содержания СОМ, наблюдаемых в дозвёздном ядре L1544, и приблизительное положение пика содержания метанола по отношению к пылевому пику. Смоделированное

расстояние между метанольным пиком и пылевым несколько больше наблюдаемого (≈ 6000 а.е. против ≈ 4000 а.е.). Это различие может быть связано с тем, что в нашей модели предполагается сферическая симметрия ядра, в то время как в реальности L1544 не является сферически симметричным.

Состав льдов в нашей модели можно считать более обоснованным, чем в предыдущих исследованиях (например, [4]): доля метанольного льда близка к наблюдаемым значениям, полученным в [112] для L1544, а доля льда CO_2 схожа с данными, которые получены космическим телескопом “Джеймс Уэбб” (JWST) для плотных тёмных облаков [53]. Модельные содержания СОМ во льду близки к содержаниям СОМ в газовой фазе горячих ядер/ядрышек (см., например [131]). В таблице 2.8 смоделированные содержания льдов СОМ сравниваются с соответствующими содержаниями СОМ в газовой фазе горячих ядер/ядрышек. В большинстве случаев обилия льдов СОМ равны обилиям СОМ в газе горячих ядер/ядрышек или превышают их. Это может означать, что СОМ, наблюдаемые в газовой фазе на более поздних стадиях звездообразования, представленных горячими ядрами/ядрышками, могли сформироваться на ранних стадиях звездообразования, в дозвёздных ядрах. Таким образом, протекающие в холодных льдах недиффузионные химические процессы, по-видимому, демонстрируют такую же эффективность в образовании СОМ, что и диффузионная химия радикалов в тёплых ($T > 30$ К) льдах горячих ядер/ядрышек, как предполагалось в [98]. Меньшее обилие органических молекул в газовой фазе горячих ядер по сравнению со льдами холодного ядра согласуется с быстрым разрушением СОМ в газофазных реакциях при их сублимации. Чтобы проследить связь путей образования СОМ, протекающих в холодных ядрах и обусловленных нагревом, потребуется изотопный анализ [132], выходящий за рамки данной работы.

В работе [14] рассматривается несколько недиффузионных механиз-

Таблица 2.8. Сравнение модельных содержаний льдов СОМ в L1544 и наблюдаемых содержаний СОМ в газовой фазе горячих ядер/ядрышек.

	CH ₃ OH	CH ₃ CHO	CH ₃ OCH ₃	НСООСН ₃	
Льды СОМ в L1544					
Пылевой пик	$7.5 \cdot 10^{-6}$	$7.3 \cdot 10^{-8}$	$1.8 \cdot 10^{-8}$	$8.3 \cdot 10^{-7}$	[A4]
Пик CH ₃ OH	$3.3 \cdot 10^{-6}$	$4.5 \cdot 10^{-8}$	$5.4 \cdot 10^{-8}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$	[A4]
Газофазные СОМ в горячих ядрах/ядрышках					
IRAS 4A	$\leq 7.0 \cdot 10^{-9}$		$\leq 2.8 \cdot 10^{-8}$	$7.0 \cdot 10^{-8}$	[131]
IRAS 4A2		$1.1\text{--}7.4 \cdot 10^{-9}$	$1.0 \cdot 10^{-8}$	$1.1 \cdot 10^{-8}$	[133]
IRAS 16293	$3.0 \cdot 10^{-7}$	$5.1 \cdot 10^{-8}$	$2.4 \cdot 10^{-7}$	$4.0 \cdot 10^{-7}$	[134]
OMC-1	$1.0 \cdot 10^{-7}$		$8.0 \cdot 10^{-9}$	$2.0 \cdot 10^{-8}$	[135]
	$1.0 \cdot 10^{-6}$	$6.0 \cdot 10^{-10}$		$9.0 \cdot 10^{-8}$	[136]
VLA 3	$6.1 \cdot 10^{-8}$			$3.3 \cdot 10^{-9}$	[137]
SVS13-A	$3.0 \cdot 10^{-8}$	$4.0 \cdot 10^{-9}$	$5.0 \cdot 10^{-8}$	$4.0 \cdot 10^{-8}$	[138]
IRAS4B	$7.0 \cdot 10^{-7}$		$< 1.2 \cdot 10^{-6}$	$1.1 \cdot 10^{-6}$	[139]
IRAS2A	$3.0 \cdot 10^{-7}$		$3.0 \cdot 10^{-8}$	$< 6.7 \cdot 10^{-7}$	[139]
HOPS 373SW	$9.0 \cdot 10^{-8}$	$2.2 \cdot 10^{-9}$		$1.7 \cdot 10^{-8}$	[140]

мов поверхностной реактивности. К ним относятся реакции Элей–Ридиала, реакции, индуцированные фотодиссоциацией, трёхчастичные или последовательные (3-body) реакции и трёхчастичные реакции с возбуждёнными реагентами (3-body excited formation). В модели GRD и MRD мы включаем все эти типы недиффузионных процессов, кроме трёхчастичных реакций с возбуждёнными реагентами. Мы также исследовали индивидуальное влияние каждого из вышеупомянутых механизмов на содержания изучаемых компонентов. При низких температурах дозвёздных ядер механизм Элей–Ридиала играет пренебрежимо малую роль. Влияние индуцированных фотодиссоциацией недиффузионных реакций более существенно. Однако модель, включающая только этот недиффузионный механизм, неспособна воспроизвести наблюдаемое содержание НСООСН₃ в газовой фазе: модельное обилие НСООСН₃ оказывается примерно на порядок величины ниже наблюдаемых значений. Во льду при этом модельное содержание

метилформиата становится более чем на три порядка ниже, чем в модели GRD. Кроме того, отношение обилий льдов CO_2 и H_2O падает до 5%. Таким образом, только модель, содержащая как индуцированные фотодиссоциацией реакции, так и последовательные реакции, отвечает всем наблюдательным данным, рассмотренным в данной работе. Внедрение в нашу модель трёхчастичных реакций с возбуждёнными реагентами, как определено в разделе 2.5 из [14], ухудшает согласие с наблюдениями из-за перепроизводства метилформиата. Детали этого механизма всё ещё неопределённые. В итоге он не был включен в наши модели GRD и MRD.

2.4.1. Отношения содержаний COM к метанолу

На рисунке 2.10 приведено сравнение содержаний газофазных COM из модели GRD, свёрнутых с одномерной функцией Гаусса, представляющей диаграмму направленности телескопа с $\text{FWHM} = 26''$, с наблюдаемыми содержаниями COM в холодных плотных ядрах, а также даны отношения лучевых концентраций COM к CH_3OH . Содержания COM и метанола в ядрах L1544, L1498, L1517B, L1521E (молекулярное облако в Тельце), L1689B (молекулярное облако в Змееносце), L183 согласуются с содержаниями, предсказанными нашей моделью для L1544, с вариациями в пределах порядка величины (см. рисунок 2.10). Содержания CH_3OH , CH_3CHO , CH_3OCH_3 в B5 и ядрах 67–800 (молекулярное облако в Персее, нумерация ядер из работы [141]) систематически превышают наши модельные значения. Такое превышение может быть следствием масштабного эффекта, то есть комбинации $\text{FWHM} \approx 60''$ и расстояния ≈ 300 пк до Персея (телескоп охватывает ≈ 18000 а.е.) в сравнении с $\text{FWHM} \approx 30''$ и расстоянием ≈ 130 пк до других ядер (телескоп охватывает ≈ 3900 а.е.). Это означает, что содержания в ядрах Персея следует сравнивать с модельными значениями для метанольного пика, а не для пылевого, и тогда результаты наблюдений согласуются с модельными. Другая возможная причина —

более высокая плотность облака, окружающего ядра Персея (которые в основном находятся в области кластерного звездообразования NGC 1333), по сравнению с относительно изолированными ядрами L1544, L1498, L1517B, L1521E, L1689B, L183. Однако в холодных плотных ядрах и других объектах (включая кометы) содержания СОМ по отношению к CH_3OH варьируются приблизительно в пределах порядка величины (см., например, [141]). Это убедительно указывает на сходство химической эволюции на разных стадиях образования маломассивных звёзд.

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

Результаты, полученные в нашей модели MRD, не воспроизводят содержания газофазных СОМ в ядре L1544. Это в некоторой степени противоречит результатам, полученным предыдущей версией нашего кода — диффузионным кодом из работы [4] с той же трактовкой РД, что и в модели MRD. Для нескольких недиффузионно образующихся на пыли СОМ реактивная десорбция пренебрежимо мала и в модели MRD, и в модели [4], однако можно было бы предположить, что сработает газофазный синтез СОМ, предложенный в [4] и присутствующий в нашей модели. Но по сравнению с моделью [4] скорости реакций были существенно обновлены согласно последним лабораторным и теоретическим исследованиям. Эти обновления в значительной мере объясняют, почему модель MRD не воспроизводит наблюдаемые содержания СОМ в L1544.

В основной модели, представленной в [4], газофазная химия метанола играет ключевую роль в образовании формальдегида и диметилового эфира. Содержание метанола на пике составляет 2.7×10^{-8} . В нашей модели MRD газофазное содержание метанола равно 2×10^{-9} . Этим объясняется эффективность газофазной химии в образовании кислородсодержащих СОМ в [4]. Пониженное содержание газофазного метанола в моде-

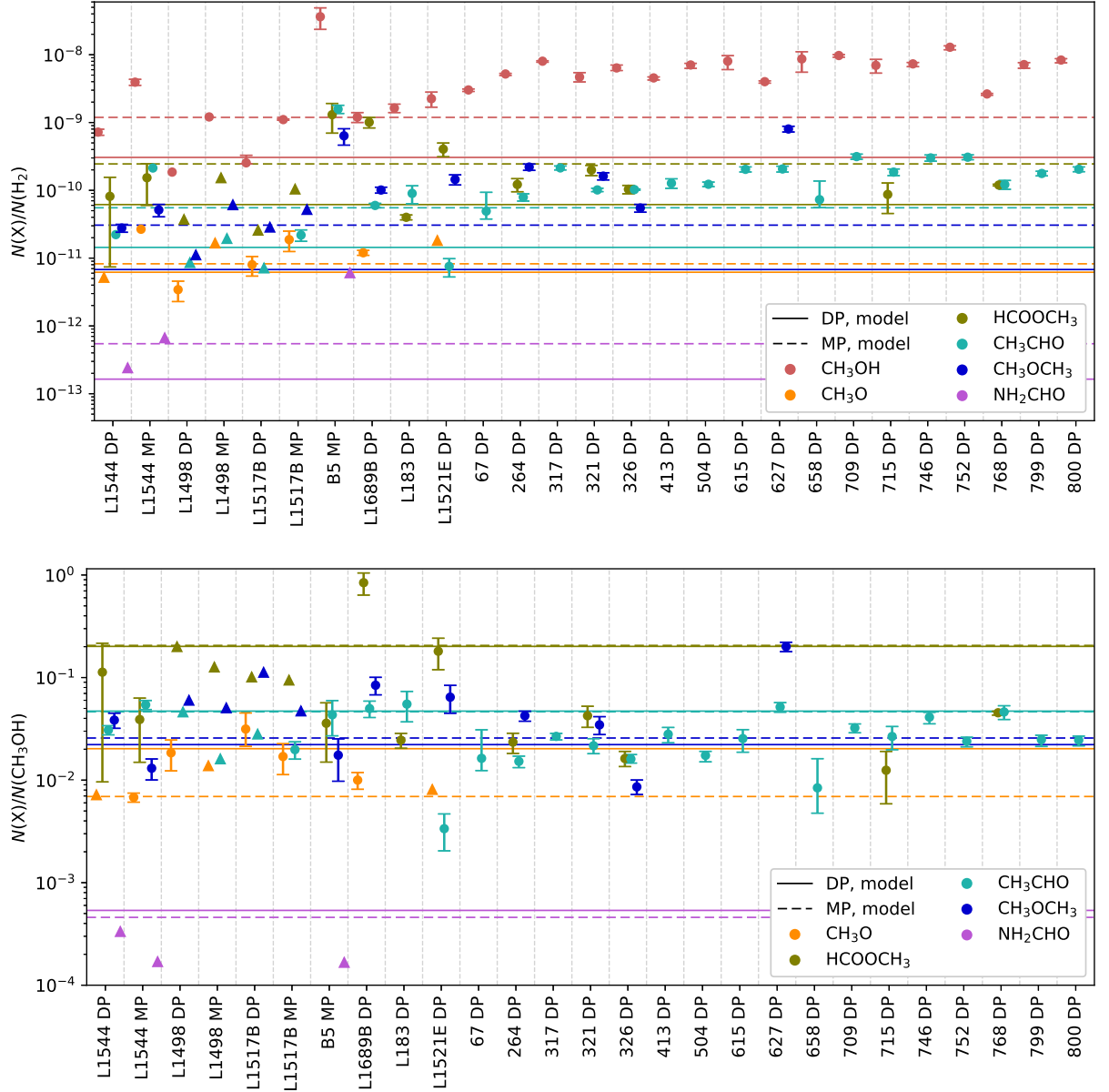


Рис. 2.10. Вверху: наблюдаемые содержания COM в холодных плотных ядрах в сравнении с модельными (GRD) содержаниями в L1544, полученным как отношения лучевых концентраций. Внизу: то же для отношения лучевых концентраций COM к CH_3OH . (Заметим, что физическая модель ядра L1544 может не быть репрезентативной для других источников в этом сравнении.) Кругами обозначены наблюдательные значения с погрешностями, треугольниками — наблюдательные верхние пределы. DP — пылевой пик, MP — метанольный пик. Модельные содержания и отношения показаны горизонтальными линиями соответствующих цветов. Наблюдательные данные взяты из [44] — L1544; [142] — L1544: метанол; [143] — L1544: метанол (пик); [43] — L1498; [40] — L1517B; [144] — B5; [145] — B5: $N(H_2)$; [36] — L1689B; [146] — L1689B: метанол и метокси-радикал, L1521E: метокси-радикал; [147] — L183; [41] — L1521E: метанол; [42] — L1521E: метилформиат, ацетальдегид, диметиловый эфир; [141] — ядра 67–800 в Персее.

ли MRD по сравнению с [4] вызвано несколькими различиями в моделях. Во-первых, барьеры 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 шире, чем в упомянутой работе: $1.35 \text{ \AA}$ (см. таблицу 2.1) против $1.2 \text{ \AA}$ в [4]. Это обуславливает более медленное гидрирование CO до CH_3OH на поверхности пыли, что уменьшает скорость доставки метанола в газ через РД. Во-вторых, в нашей 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 H_2 сквозь барьеры диффузии не помогает улучшить согласие между результатами модели MRD и наблюдательными данными. Далее, как упомянуто выше, в нашей работе используются последние оценки скорости для ключевой газовой фазной реакции $\text{CH}_3 + \text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_3 + h\nu$, предложенные в [113]. Её скорость стала на порядок ниже, чем в [4]. Вследствие вышеперечисленных факторов модель MRD оказывается неспособной объяснить газофазные содержания COM в L1544, в отличие от модели, представленной в [4].

Отметим также, что содержание льда метанола в [4] достигает 40% по отношению к водяному льду, тогда как в нашей работе его содержание приблизительно вчетверо ниже. Перепроизводство метанольного льда в [4] частично объясняется недостаточной эффективностью механизмов образования льда CO_2 из CO. Действительно, диффузионные 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 $\leq 10 \text{ K}$ в [4], поскольку в их модели отсутствуют недиффузионные механизмы, а отношение энергии диффузии молекул к их энергии десорбции довольно высоко и составляет 0.5. Для производства достаточного количества льда CO_2 в подобных условиях необходимы недиффузионные механизмы.

Лучшее согласие результатов нашей модели GRD с наблюдениями

по сравнению с моделью [4] также объясняется различными путями образования СОМ. В наших расчётах СОМ преимущественно образуются на пыли в недиффузионных реакциях радикалов (CH_3CHO также образуется в цепочке, предложенной [103]), попадая в газ посредством эффективной РД [61], усиленной петлями присоединения/абстракции Н. В работе [4] СОМ преимущественно формировались в газофазных цепочках реакций с участием CH_3OH в качестве прекурсора. Содержание СОМ сильно зависело от содержания метанола, а отношение содержаний СОМ к метанолу было ниже, чем в нашей модели.

Интересно, что частичный перенос вещества с пыли в газ является ключевым механизмом независимо от того, отвечает за образование СОМ в дозвёздных ядрах газофазная или поверхностная химия. В первом случае РД доставляет прекурсоры СОМ в газ. Во втором случае, если СОМ образуются на пыли, они должны каким-то образом попасть в газ. В холодной, тёмной и плотной среде дозвёздных облаков РД является перспективным кандидатом для объяснения такой доставки.

2.4.3. Коэффициент прилипания

Существуют численные и лабораторные исследования, которые оценивают температурозависимый коэффициент прилипания для лёгких компонентов Н и H_2 [148–155] и более тяжёлых молекул, таких как N_2 , O_2 и СО [156–158].

Коэффициент прилипания для атомов водорода сложно измерить в лабораторных условиях. Классическое молекулярно-динамическое моделирование, проведённое в работе [150] на аморфном ледяном субстрате, предсказывает вероятность прилипания атомов водорода в диапазоне 0.7–1.0 при температуре аморфного ледяного субстрата 10 К и поступающей энергии 100 К (рисунок 4 в их статье). Расчёты из работы [159] показали, что коэффициент прилипания для атомов водорода составляет 0.85.

В нашей модели коэффициент прилипания равен единице для всех компонентов, за исключением Н. Для атомарного водорода коэффициент прилипания рассчитывается согласно [79] и составляет ≈ 0.8 при температуре пыли 10 К.

2.4.4. Распыление космическими лучами

Согласно результатам данной главы, для получения газофазных концентраций СОМ в ядре L1544, близких к наблюдаемым, необходимо использовать трактовку РД, в которой доля десорбирующего вещества при образовании СОМ на поверхности пыли составляет $\sim 0.1\%$. Эта трактовка основана на RRK-теории и предложена в [98]. Однако есть и другие виды нетепловой десорбции, которые могли бы оказаться эффективными для получения СОМ в газе. В недавних экспериментальных работах [160–162] 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 [163], 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 твердофазного вещества применялись параметры для водяного льда.

В нашей модели единственным значимым эффектом распыления оказалось увеличение содержаний 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 отношения лучевых концентраций $N(X)/N(\text{H}_2)$, которое использовалось для сравнения с наблюдениями. Полученный результат частично находится в согласии с выводом из работы [163]: её авторы 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 численных плотностях газа выше $\approx 3 \times 10^5 \text{ см}^{-3}$, тогда как в [163] приводят значение плотности газа $4 \times 10^4 \text{ см}^{-3}$. Следует отметить, что наша модель и модель из [163] существенно различаются: так, их модель содержит химию ван-дер-ваальсовых комплексов [49] и не включает в себя недиффузионную химию. Содержания СОМ во льду и его основных компонентов не претерпевают изменений при внедрении распыления космическими лучами в нашу модель.

2.5. Заключение по Главе 2

В данной главе представлено астрохимическое моделирование образования сложных органических молекул и основных компонентов льда в дозвёздном ядре L1544. С этой целью использовалась обновлённая версия кода MONACO, который сейчас включает в себя базовую трактовку недиффузионных механизмов на пыли, поверхностные реакции с H_2 , реакции абстракции водорода, а также некоторые важные обновления скоростей газофазных и поверхностных процессов. Наиболее значимые результаты можно суммировать следующим образом.

- Обновлённая модель MONACO, включающая в себя недиффузионные химические процессы в ледяных мантиях и обновлённые согласно недавним лабораторным и теоретическим исследованиям пути образования 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 воспро-

изведены содержания газопазных СОМ и положение метанольного пика в L1544 моделью, включающей в себя недиффузионную химию.

- Механизм недиффузионной химии радикалов, предложенный в [15] и [17], внедрён в код MONACO согласно математическому подходу из работы [14]. Он оказался эффективным для производства СОМ в ледяных мантиях холодных ($T_{\text{dust}} < 10 \text{ K}$) межзвёздных пылинок с содержаниями 0.1–3% по отношению к водяному льду. Важно, что содержания СОМ во льду подобны газопазным содержаниям этих же соединений в горячих ядрах/ядрышках. Это поддерживает предположение, что наблюдаемые в газе горячих ядер СОМ сформировались ранее стадии нагрева при переходе от холодных дозвёздных ядер к горячим ядрам/ядрышкам.
- Обнаружено, что параметризация эффективности РД, используемая в модели, критически влияет на содержания СОМ в газовой фазе и умеренно влияет на содержания 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 главе, эффективность РД для доставки необходимого количества СОМ в газ должна составлять $\sim 0.1\%$, чтобы результаты моделирования согласовывались с результатами наблюдений. В нашей модели такой уровень десорбции для сложных молекул достигается только при расчёте скорости РД согласно RRK-теории. Ни распыление космическими лучами, предложенное в [163], ни РД по Миниссале [58] не оказали нужного влияния на содержание газопазных СОМ.

2.6. Положения, выносимые на защиту по результатам Главы 2

- Впервые показано, что модель, включающая в себя недиффузионные химические процессы в ледяных мантиях пылинок, позволяет успешно воспроизвести газофазные содержания сложных органических соединений (CH_3OH , CH_3CHO , CH_3OCH_3 , HCOOCH_3 , NH_2CHO), а также положение пика содержания метанола в дозвёздном ядре L1544. Показано, что для объяснения наблюдаемых содержаний сложных органических молекул, синтезируемых в поверхностных реакциях, достаточно предположения о реактивной десорбции с эффективностью $\sim 0.1\%$.
- Показано, что теоретические содержания твердофазных сложных органических соединений в дозвёздном ядре L1544 составляют 0.1–3% по отношению ко льду H_2O . Наилучшее согласие с наблюдательными данными достигается при значении отношения барьера диффузии частиц на поверхности пыли к их энергии десорбции, равном 0.5 для атомов и 0.3 для молекул.

Глава 3. Корреляция между содержаниями формальдегида и метанола в холодных плотных ядрах

3.1. Введение

Формальдегид (H_2CO) широко распространён в областях звездообразования — в частности, он обнаружен в межзвёздных льдах [164, 165]. Наряду со своими прямыми химическими производными, HCO , CH_3O и CH_2OH , он играет важную роль в образовании кислородсодержащих СОМ, включая альдегиды и многоатомные спирты [166, 167], при низких температурах. Как отмечалось в предыдущей главе, в настоящее время СОМ найдены во многих холодных плотных ядрах, например, в L1544, В5, ядрах в волокне L1495, L1521E [42, 44, 144, 168, 169], — удобных объектах для изучения первичного формирования СОМ. В таких условиях ($T \approx 10$ К, $n > 10^4$ см $^{-3}$) образование формальдегида напрямую связано с образованием в ледяных мантиях метанола, который часто называют простейшей СОМ и используют в качестве эталона распространённости СОМ в наблюдательных и теоретических исследованиях [4, 42, 44].

Астрохимические модели успешно воспроизводят наблюдаемое содержание монооксида углерода, метанола и других СОМ, однако переоценивают содержание формальдегида в газовой фазе, в том числе по сравнению с содержанием метанола. Конкретно, модели предсказывают, что в холодных плотных ядрах газофазного формальдегида больше, чем газофазного метанола [4, 57, 170–172]. Это противоречит результатам наблюдений, которые выявляют противоположную тенденцию [142, 173–177]. Насколько нам известно, лишь две химические модели [57, 61] показали преобладание метанола над формальдегидом при температурах (8–12 К) и химических

возрастах ($\approx 500\text{--}900$ тысяч лет), типичных для дозвёздных ядер. Однако в этих моделях не делалось попыток воспроизвести наблюдаемую степень вымораживания CO или радиальные профили содержаний молекул в ядрах.

Предполагается, что в холодных плотных ядрах метанол образуется на поверхности ледяных мантий пылинок путём последовательного гидрирования CO: $\text{CO} \leftrightarrow \text{HCO} \leftrightarrow \text{H}_2\text{CO} \leftrightarrow \text{CH}_2\text{OH}/\text{CH}_3\text{O} \leftrightarrow \text{CH}_3\text{OH}$ [78, 178, 179]. Формальдегид — промежуточный продукт в этой цепочке реакций. На каждом её шаге продукты могут десорбировать в газовую фазу и стать доступными для субмиллиметровых наблюдений. Кроме того, любой из продуктов, образующихся в цепочке гидрирования, может участвовать в реакциях абстракции атома водорода, приводящих к восстановлению исходного реагента [63, 180, 181]. Преобладание метанола над формальдегидом является ещё одним важным окном в химию ледяных мантий пылинок, возможно, указывая на смещение баланса на последнем шаге в пользу образования метанола или эффективности его десорбции. Отношение содержаний $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$ может дать ценную информацию об общем балансе в цепочке гидрирования CO или о вероятности реактивной десорбции (РД) на её шагах. Недавние лабораторные исследования показали, что на последнем шаге данной цепочки CH_3O также может прореагировать с H_2 или H_2CO , образуя CH_3OH [101]. Это тоже способно повлиять на баланс между реакциями образования и разрушения CH_3OH и на эффективность РД метанола. Помимо образования на поверхности пыли, формальдегид может формироваться в газовой фазе в реакции $\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$ [182–184].

В данной главе исследуются пути образования и разрушения формальдегида, используемые в большинстве химических моделей холодных плотных ядер, а также механизмы адсорбции (вымораживания) и десорбции. Мы детально рассматриваем этапы, отсутствие которых может привести к перепроизводству формальдегида. Полученные результаты сопостав-

ляются с большим однородным набором наблюдаемых линий формальдегида [A3] и метанола [72] в семи плотных ядрах волокна L1495 в Тельце — близкой к нам (130–135 пк) области формирования скоплений маломассивных звёзд [185, 186]. Обсуждается корреляция между содержаниями метанола и формальдегида в холодных плотных ядрах, проблемы моделирования химии формальдегида и вероятные причины наблюдаемого низкого обилия формальдегида в областях звездообразования.

3.2. Моделирование

3.2.1. Профили физических условий в ядрах

Для моделирования используются профили физических условий в холодных плотных ядрах волокна L1495, построенные аналогично тому, как это сделано в работе [72]. Значения лучевой концентрации молекулярного водорода $N(\text{H}_2)$ и температуры пыли T_{dust} оценены в работе [72] по данным наблюдений непрерывного излучения пыли, которые получены с помощью Herschel/SPIRE. В качестве радиальных распределений $N(\text{H}_2)$ и T_{dust} мы используем средние значения по кольцу шириной в один пиксель с центром в пылевом пике. Десяти концентрических колец достаточно для описания физических условий в ядрах, где внешние значения $N(\text{H}_2)$ близки друг к другу ($\approx 9 \times 10^{21} \text{ см}^{-2}$). Затем лучевая концентрация $N(\text{H}_2)$ конвертируется в численную концентрацию $n(\text{H}_2)$ в предположении сферической симметрии ядер с одинаковой структурой на луче зрения и в картинной плоскости, как описано в [187] и применено в [72]. Температура газа считается равной температуре пыли T_{dust} . Профили физических условий в ядрах показаны на рисунке 3.1. Ядра обозначены как Core 1, Core 6, Core 7, Core 10, Core 11, Core 16, следуя нумерации из [188], и Core 35, следуя нумерации из [189].

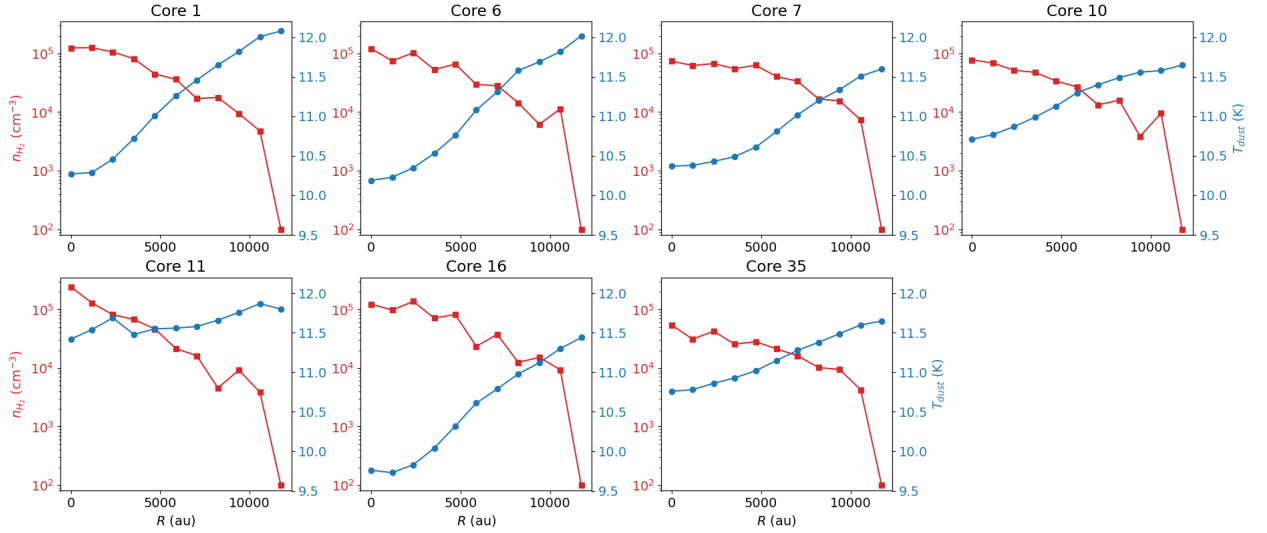


Рис. 3.1. Физические модели ядер: численная плотность молекулярного водорода (красный) и температура пыли (синий).

3.2.2. Описание модели

Для моделирования используется обновлённый недиффузионный код MONACO, описанный в Главе 2. Будучи нуль-мерным кодом, MONACO вычисляет зависящие от времени относительные содержания химических соединений отдельно для каждой радиальной точки физической модели ядра. Относительные содержания, рассчитанные на наборе радиальных точек, затем преобразуются в лучевые концентрации для более прямого сравнения с наблюдениями. Реализация недиффузионных процессов в ледяных мантиях пылинок [14] позволяет адсорбированным тяжёлым радикалам эффективно взаимодействовать даже при низких температурах, типичных для холодных плотных ядер.

Химическая эволюция ядер, включённых в волокно L1495, моделируется в два этапа. Как и в Главе 2, на начальной стадии задаются физические условия полупрозрачного облака: плотность газа составляет 10^3 см^{-3} , экстинкция в видимом диапазоне $A_V = 2^m$, температура газа и пыли линейно падает с 15 K до 10 K в течение 10^6 лет эволюции. Исходный химический состав соответствует “низкометаллическим” содержаниям E41 из таблицы 1 в [91], водород изначально находится в молекулярной форме. Относитель-

ные содержания, полученные в конечный момент времени данного этапа, затем используются в качестве начального химического состава для каждой радиальной точки второго этапа, где моделируется химия в холодных плотных ядрах.

Как и в модели GRD из Главы 2, параметризация реактивной десорбции в целом согласуется с параметризацией, которая предложена в [61] и основывается на теории Райса–Рамспергера–Кесселя (RRK). Доля реактивной десорбции — параметр a из выражения (2) в [61] — составляет 0.01. Единственное отличие от [61] заключается в том, что десорбция происходит только с не покрытой водяным льдом поверхности, как обсуждалось в [4].

В нашей модели туннелирование через диффузионные барьеры для лёгких частиц (H и H₂) в твёрдой фазе исключено, тогда как туннелирование через барьеры активации включено. Для реакций, имеющих барьер активации, принимается в расчёт конкуренция реакция-диффузия [2]. Отношение энергии диффузии частицы к её энергии десорбции составляет 0.5 для атомарных частиц и 0.3 для молекул. Например, для атомов H с энергией десорбции 450 K [107] энергия диффузии равна 225 K — это значение находится внутри диапазона энергий, полученного в лабораторных исследованиях для диффузии H на аморфном водяном льду [93], а также оно близко к наименьшему значению 255 K для энергии диффузии H на чистом льду CO [190]. Остальные параметры модели совпадают с упомянутыми в Главе 2.

В астрохимический код были включены новые реакции, отражающие результаты недавних теоретических и экспериментальных исследований. Реакции абстракции водорода включены на каждом этапе цепочки гидрирования CO [14], добавлена экспериментально подтверждённая [101] реакция $\text{gCH}_3\text{O} + \text{gH}_2\text{CO} \rightarrow \text{gCH}_3\text{OH} + \text{gHCO}$ с барьером 2670 K из [100]. Также включена реакция $\text{gC} + \text{gH}_2\text{O} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$, в которой, как было показано экс-

периментально, образуется H_2CO в твёрдой фазе [102]. Здесь упомянуты процессы, касающиеся образования и разрушения формальдегида; более подробно изменения в астрохимической сетке нашей модели освещены в разделе 2.2.3 Главы 2 и Приложении 2.

Далее исследуются факторы, которые могут влиять на содержание H_2CO в газовой фазе и на отношение содержаний $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$. Варианты расчётов, не приводящие к значительному снижению содержания H_2CO и отношения $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$, описаны в Приложении 3. Ниже представлены результаты двух версий модели: базовой и версии с дополнительным каналом для реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$ — наиболее эффективного процесса образования H_2CO .

3.2.3. Результаты моделирования

Анализ результатов моделирования и их сравнение с наблюдениями проводятся для момента времени, когда в модели достигается максимальная наблюдаемая степень вымораживания CO для каждого из ядер (см. таблицу 3.1). Степень вымораживания CO в точке (t, r) во времени и пространстве рассчитывается как $f_d^{(t,r)} = N_{\text{max}}^{(r)}(\text{CO})/N^{(t,r)}(\text{CO})$, где $N_{\text{max}}^{(r)}(\text{CO})$ — максимум по времени для лучевой концентрации CO в определённой радиальной точке r , а $N^{(t,r)}(\text{CO})$ — лучевая концентрация CO в точке (t, r) .

Основной канал образования H_2CO в нашей модели — газофазная реакция $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{CO}$ с коэффициентом скорости $1.4 \times 10^{-10} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$, унаследованным из базы данных OSU. Это единственный канал для данной реакции, присутствующий в нашей базовой модели. Для профиля физических условий ядра Core 1 этот канал отвечает за 88% образования H_2CO на момент достижения наблюдаемой степени вымораживания CO (процент для остальных ядер аналогичен). Другой важный источник H_2CO — РД в поверхностной реакции $\text{gH} + \text{gHCO} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$, которая поставляет 11% газообразного формальдегида. Скорость диссоциативной рекомбина-

Таблица 3.1. Химический возраст ядер, соответствующий максимальной наблюдаемой степени вымораживания CO, f_d . Он одинаков для базовой модели и для модели с дополнительным каналом у реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$.

Ядро	f_d	Возраст (тыс. лет)
1	8	110
6	14	196
7	4	87
10	12	248
11	44	498
16	17	196
35	4	175

ции H_3CO^+ , приводящей к образованию $\text{H}_2\text{CO} + \text{H}$, в три раза выше скорости поступления H_2CO в газ посредством РД, однако основным источником иона H_3CO^+ является реакция между самим H_2CO и H_3^+ . Выключение канала $\text{H}_3\text{CO}^+ + e^- \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$ снижает содержание H_2CO лишь в 1.3 раза в центральных областях ядра. Таким образом, эта реакция оказывает незначительное влияние на образование формальдегида.

Наряду с базовой моделью мы также рассматриваем модель с дополнительным каналом для реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$ (далее “модель с дополнительным каналом”). Эта реакция играет важную роль в химии горения, она активно изучалась — хотя и при высоких температурах — в течение последних четырёх десятилетий (см. рисунок 5 и ссылки в [184]). В результате взаимодействия CH_3 и O образуется высоковозбуждённый радикал CH_3O^* , который далее распадается по различным доступным каналам: (а) $\text{H}_2\text{CO} + \text{H}$, (б) $\text{HCO} + \text{H}_2$, (в) $\text{CON} + \text{H}_2$ и (г) $\text{CH} + \text{H}_2\text{O}$ [183, 184]. В условиях высокой температуры и высокого давления доминируют каналы (а) и (б) с соотношением ≈ 1.5 по последним оценкам. Согласно [184], радикал HCO, образующийся в канале (б), нестабилен и может быстро распасться на CO и H. Такая фрагментация ещё более вероятна в условиях низкого давления

Таблица 3.2. Каналы реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$ и их доли в базовой модели и в модели с дополнительным каналом.

Канал реакции	Базовая модель	Модель с доп. каналом
(а) $\text{H}_2\text{CO} + \text{H}$	1	1/9
(б) $\text{CO} + \text{H}_2 + \text{H}$	0	8/9

и низкой температуры холодных плотных ядер при отсутствии столкновительного охлаждения. Избыточная энергия образования $\text{HCO} + \text{H}_2$ составляет 80.7 ккал/моль (40610 K), она распределяется между продуктами реакции. Реакция $\text{HCO} \rightarrow \text{CO} + \text{H}$ имеет барьер активации 17.7 ккал/моль (8907 K). Вследствие низкой плотности и малых скоростей соударения в межзвёздной среде скорость релаксации также низка, и HCO может распасться на CO и H . Начальный избыток энергии может использоваться для преодоления барьера реакции. В связи с отсутствием точных данных о скорости реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$ при низких температурах и соотношении её каналов, мы добавили в сетку астрохимических реакций канал (б) в виде $\text{CO} + \text{H}_2 + \text{H}$ для условий холодных плотных ядер. Мы предполагаем, что эта ветвь является доминирующей, поскольку образование трёх продуктов способствует распределению высокой избыточной энергии реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$.

Насколько нам известно, нет экспериментальных работ, где давалась бы общая скорость реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$ и соотношение её каналов при низких температурах (≈ 10 K). В астрохимических базах данных KIDA [191] и UMIST [192] реакция $\text{CH}_3 + \text{O}$ имеет два канала, (а) $\text{H} + \text{H}_2\text{CO}$ и (б) $\text{CO} + \text{H}_2 + \text{H}$, с соотношением $\approx 5:1$. Однако скорости реакции были получены в исследованиях горения или химии атмосферы для диапазонов температур, как правило, более высоких, чем у холодных плотных ядер (50–2500 K) [182, 193–196]. Некоторые экспериментальные и теоретические исследования сообщают о температурной зависимости для этой реакции — уменьшении её коэффициента скорости при понижении температуры; см.,

например, [194] и [197]. Для описания температурной зависимости коэффициента скорости данной реакции авторы [194] предлагают формулу Аррениуса $k_{\text{CH}_3+\text{O}} = (2.4 \pm 0.3) \times 10^{-10} \exp(-(202 \pm 60)\text{K}/T) \text{ см}^3 \text{ молекула}^{-1} \text{ с}^{-1}$ с “эффективным барьером” $202 \pm 60 \text{ K}$. Однако в [194] подчёркивают, что это выражение следует использовать только в изученном ими диапазоне температур от 354 до 935 K. Исследования этой реакции при более высоких температурах ($> 295 \text{ K}$) показывают существенно различные коэффициенты ветвления — см., например, [183, 198, 199]. Поскольку однозначная информация о коэффициенте ветвления отсутствует, мы варьируем его, как описано ниже.

При соотношении каналов $\text{CO} + \text{H}_2 + \text{H} : \text{H}_2\text{CO} + \text{H} : \text{CON} + \text{H}_2 : \text{CH} + \text{H}_2\text{O}$, равном $1 : 1 : 0 : 0$, содержание формальдегида падает в 1.8 раза по сравнению с результатами базовой модели. Чтобы проверить влияние температурной зависимости и вклада канала образования $\text{H}_2\text{CO} + \text{H}$ среди других ветвей этой реакции, мы также провели численное моделирование с различными соотношениями между каналами $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$ и $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2 + \text{H}$, равными $2 : 1$, $4 : 1$, $8 : 1$ и $16 : 1$. Наилучшее соответствие наблюдениям достигается при $\text{CO} + \text{H}_2 + \text{H} : \text{H}_2\text{CO} + \text{H} = 8 : 1$ (см. таблицу 3.2), что выходит за рамки соотношений, представленных ранее в литературе, которая описывает исследования реакции при высоких температурах. Дальнейшее увеличение этого соотношения (например, до $16 : 1$) оказывает пренебрежимо малое влияние на содержание H_2CO , поскольку образование H_2CO далее определяется реактивной десорбцией в поверхностной реакции $\text{gH} + \text{gHCO} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$.

В обеих версиях нашей модели лёд формальдегида составляет $\approx 10\%$ от водяного льда в центральных областях ядер (2000 а.е. для ядер 10, 11 и 35, 4000 а.е. для всех остальных ядер; см. рисунок 3.2). В направлении к краю ядра содержание формальдегида постепенно уменьшается до $\leq 0.1\%$ от водяного льда. (Наблюдения в ИК-диапазоне показали, что обилие

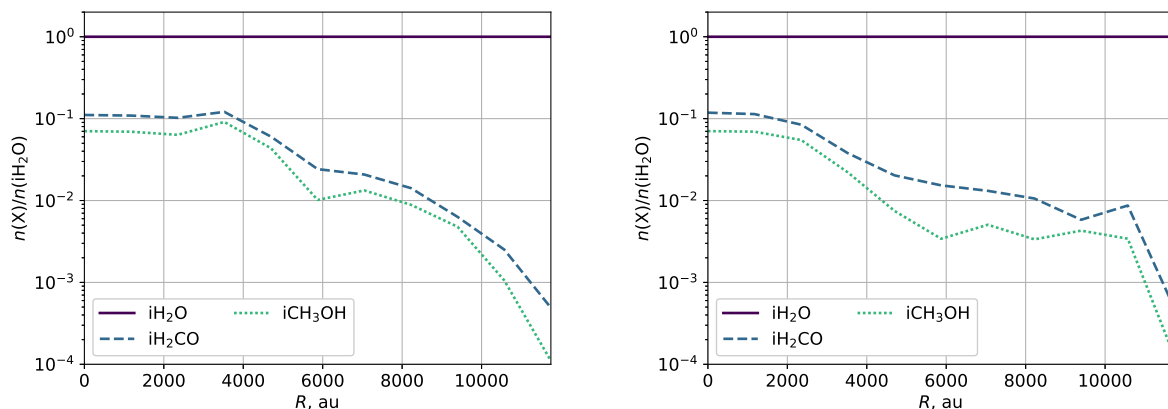


Рис. 3.2. Радиальные профили модельных обилий льдов H_2CO и CH_3OH по отношению к льду H_2O для ядра 1 (слева) и ядра 10 (справа). Префикс “i” обозначает общее содержание компонента во льду — как на поверхности, так и в толще мантии.

H_2CO составляет 6% от обилия льда H_2O [164]). Лёд CH_3OH следует тому же радиальному тренду с содержанием немного ниже (в 1.5–4.5 раза), чем у H_2CO . Эти прогнозы можно использовать для планирования наблюдений льдов в ИК-диапазоне с помощью космического телескопа “Джеймс Уэбб” (JWST).

3.2.4. Сравнение результатов моделирования и наблюдений

На рисунке 3.3 приведено сравнение с наблюдениями результатов базовой модели (сплошные синие линии) и модели с дополнительным каналом (штрихпунктирные чёрные линии). На панелях в левом столбце отображено содержание окиси углерода CO. Окись углерода — финальный “резервуар” для углерода в газовой фазе при отношении C/O ниже 1. До вымораживания содержание этой молекулы в тёмных облаках относительно постоянно и близко к элементному содержанию углерода. Пути образования и распада CO детально описаны, поэтому его содержание может служить тестом для моделей. Обе модели дают практически одинаковый результат для обилия CO, слегка его занижая по сравнению с наблюдениями. Небольшое (в несколько раз) занижение может объясняться тем, что мо-

дели показывают содержание СО только в ядре, тогда как в наблюдениях мы также видим СО в окружающем ядро облаке. Причиной недооценки также может стать недостаточное содержание углерода в модели [72].

На средней и правой панелях рисунка 3.3 показано содержание формальдегида в зависимости от поглощения в видимом диапазоне и степени вымораживания СО. Базовая модель на порядок завышает содержание формальдегида. Однако корреляция между формальдегидом, поглощением в видимом диапазоне и степенью вымораживания СО воспроизводится хорошо — за исключением ядра Core 7, где обе модели не отражают снижение содержания формальдегида с ростом A_V и f_d . Корректно воспроизведённые корреляции с систематической разницей в содержаниях могут указывать либо на завышение скорости образования H_2CO , либо на занижение скорости его разрушения, в то время как общая модель может быть верна. Модель с дополнительным каналом достаточно хорошо воспроизводит наблюдаемое содержание формальдегида: для ядер Core 1, Core 6, Core 10, Core 35 мы получаем верхние наблюдательные значения, для ядер Core 7 и Core 16 модель переоценивает содержание формальдегида в несколько раз, а для ядра Core 11 с протозвездой внутри — недооценивает в несколько раз.

На рисунке 3.4 продемонстрированы содержания формальдегида и метанола, а также отношение $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$ как функции A_V в обновлённой модели MONACO (базовой и с дополнительным каналом) и её предыдущей версии, использованной в работе [72], где исследовалось содержание метанола в том же наборе холодных плотных ядер. Содержания как метанола, так и формальдегида снижаются при повышении A_V и f_d .

Модель из [72] — это диффузионная (без внедрения недиффузионных реакций) модель с включённым туннелированием для диффузии атомов водорода и эффективностью РД, рассчитанной согласно работе Миниссале с соавторами [58] (далее “старая модель”). Старая модель переоценивает содержание формальдегида даже сильнее, чем новая базовая модель. Содер-

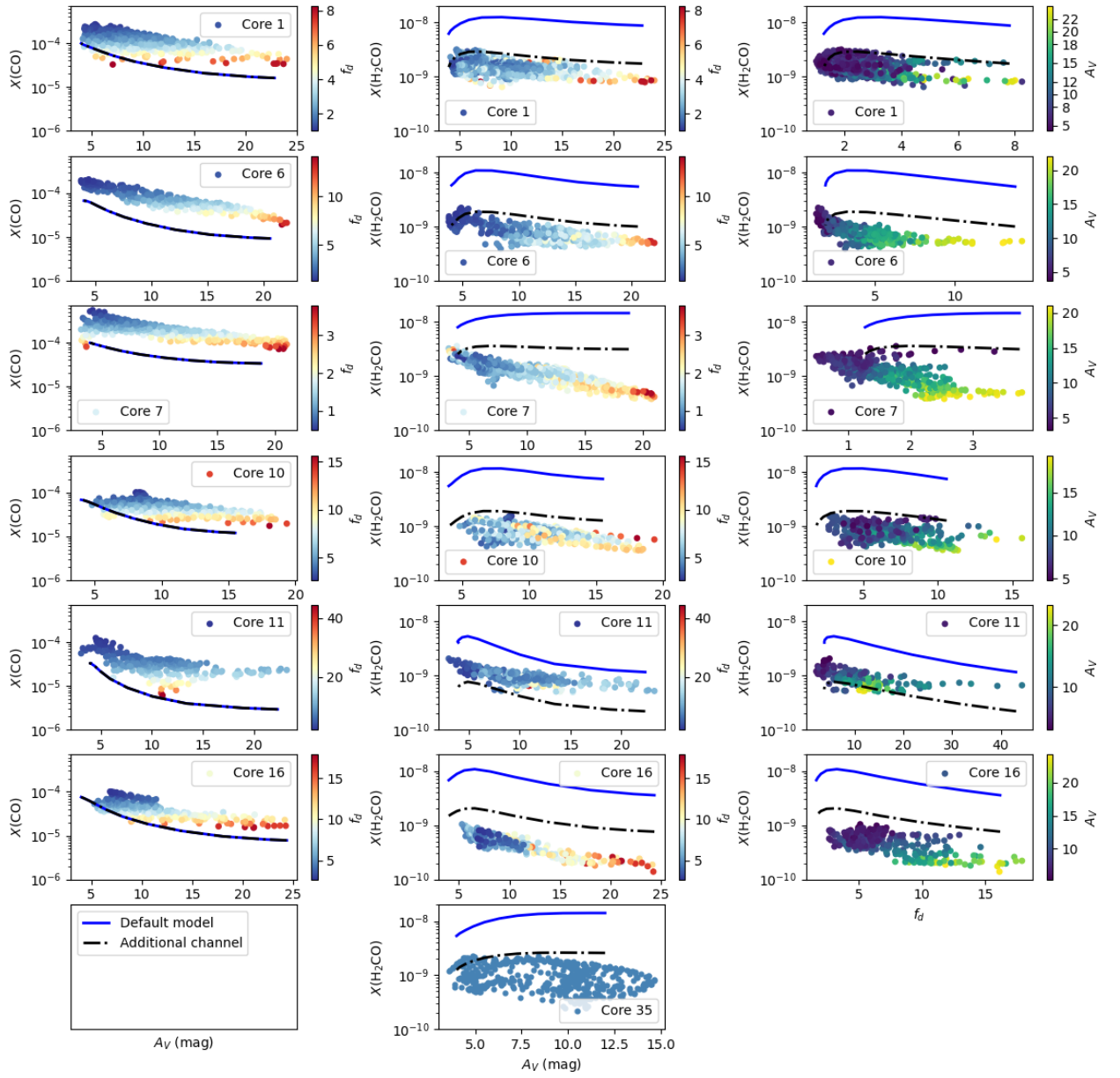


Рис. 3.3. Сравнение наблюдательных (цветные точки) и смоделированных профилей содержания CO как функции поглощения в видимом диапазоне (слева); профилей содержания H_2CO как функции поглощения в видимом диапазоне (посередине) и как функции степени вымораживания CO (справа) для каждого из ядер. Цветовая шкала показывает степень вымораживания CO f_d (слева и посередине) и поглощение в видимом диапазоне A_V (справа) для каждой точки. Все точки ядра 35 одного и того же цвета, поскольку для этого ядра нет данных по CO. Используемые модели: базовая недиффузионная (сплошная синяя линия) и недиффузионная модель с дополнительным каналом для реакции $\text{CN}_3 + \text{O}$ (штрихпунктирная чёрная линия).

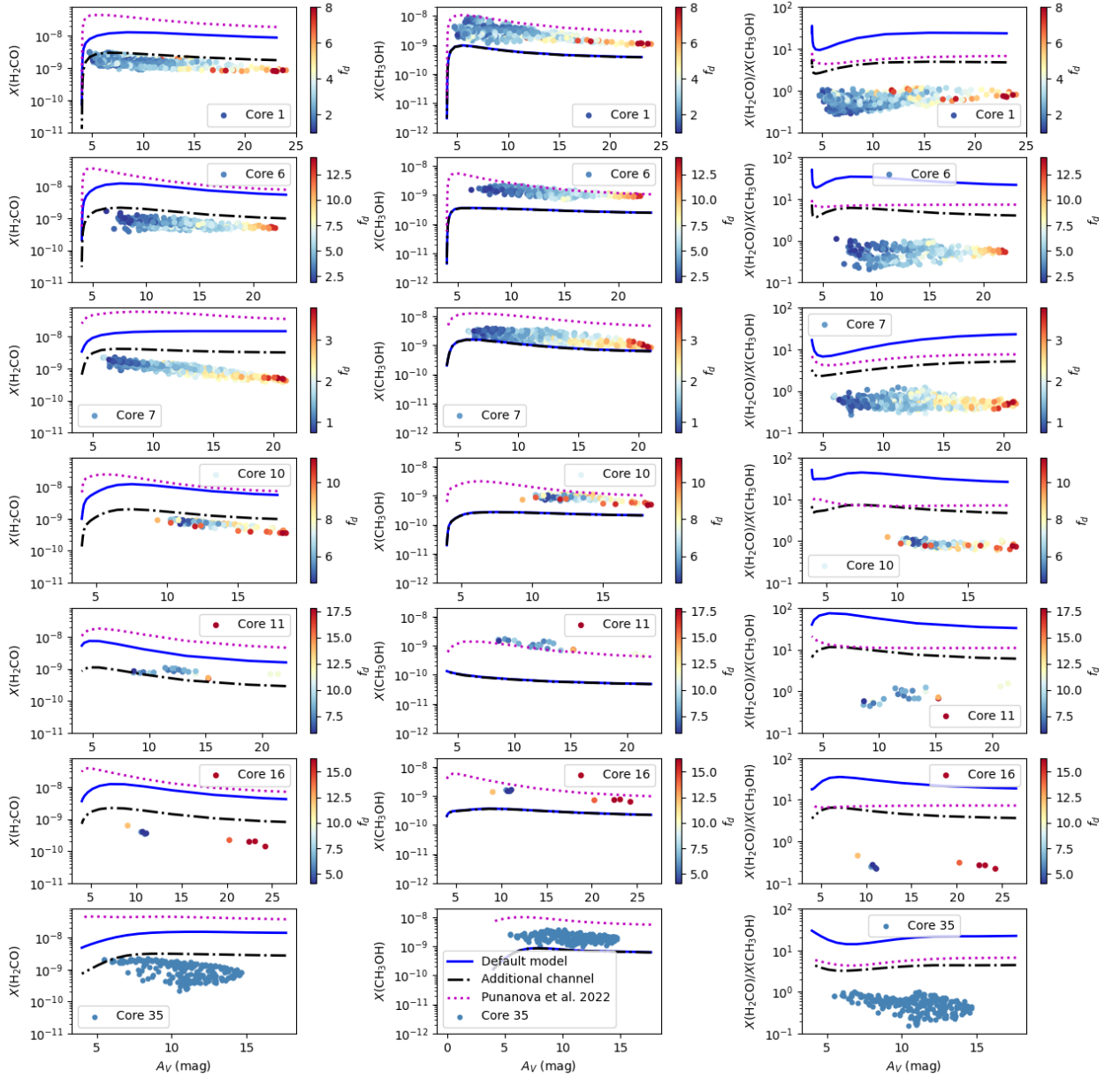


Рис. 3.4. Сравнение наблюдательных (цветные точки) и смоделированных профилей содержаний H_2CO (слева) и CH_3OH (посередине), а также отношения содержаний $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$ (справа) как функций поглощения в видимом диапазоне для каждого из ядер. Цветовая шкала отмечает степень вымораживания CO f_d для каждой точки. Все точки ядра 35 одного цвета, поскольку для этого ядра нет данных по CO. Использованы следующие модели: базовая недиффузионная модель (сплошная синяя линия), недиффузионная модель с дополнительным каналом для реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$ (штрихпунктирная чёрная линия), старая версия кода MONACO с туннелированием для диффузии H и H_2 и эффективностью реактивной десорбции согласно Миниссале [58], использованная в [72] (пунктирная розовая линия).

жение метанола одинаково в моделях по умолчанию и с дополнительным каналом, при этом оно занижено в несколько раз либо идёт по нижней границе наблюдательных значений (ядро 7). Старая модель воспроизводит содержание метанола лучше новых. Отношение содержаний $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$ базовая модель переоценивает примерно на порядок величины, в то время как модель с дополнительным каналом и старая модель переоценивают его в несколько раз. Из этих трёх моделей наиболее близкое к наблюдаемому отношение $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$ даёт модель с дополнительным каналом.

3.3. Обсуждение результатов

Тогда как в холодных плотных ядрах метанол эффективно образуется только в ледяных мантиях пылинок, формальдегид может образовываться как в реакциях на пыли, так и в газофазных. Наша модель предполагает преобладание газофазного канала образования H_2CO , что косвенно подтверждается наблюдаемым отношением содержаний орто-формальдегида и пара-формальдегида $o/p \approx 2$, как предложено в работе [200]. Астрохимические модели предсказывают, что формальдегид должен быть более распространён, чем метанол, однако в наблюдениях мы скорее видим недостаток формальдегида: его содержание либо приблизительно совпадает с содержанием метанола, либо в 2–5 раз меньше. На рисунке 3.5 для каждого из ядер изображены обилия метанола и формальдегида в одних и тех же координатных шкалах с указанием степени вымораживания CO в каждой точке. Эти графики показывают, что: (1) для всех ядер формальдегид менее распространён, чем метанол; (2) содержания метанола и формальдегида уменьшаются с ростом степени вымораживания CO, начиная с максимального содержания для $f_d \approx 1.5$; (3) имеет место широкий разброс отношения содержаний, особенно в ядре 6.

В работе [72] туннелирование для диффузии атомов водорода было необходимым условием, чтобы воспроизвести содержание метанола в хо-

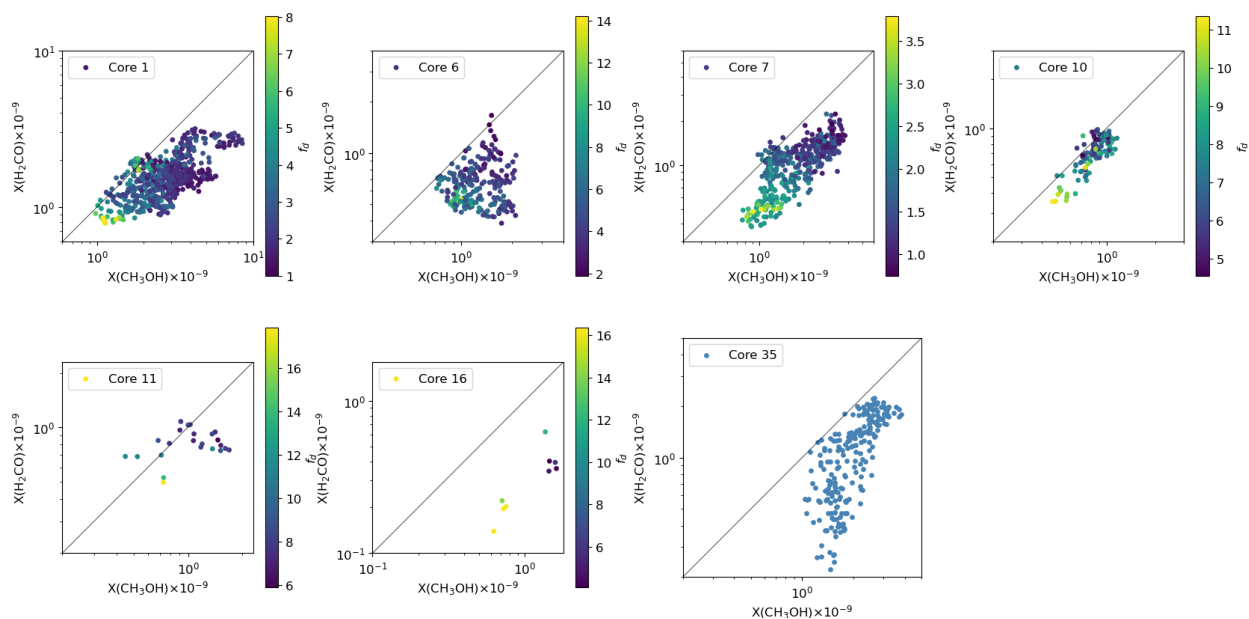


Рис. 3.5. Содержание формальдегида как функция содержания метанола. Цветовая шкала показывает степень вымораживания CO, f_d . Тонкой чёрной линией отмечена корреляция 1:1.

лодных плотных ядрах: включение/выключение туннелирования изменяло содержание метанола на 1–2 порядка величины (10^{-11} – 10^{-9} относительно содержания H_2), в то время как выбор различных трактовок РД менял содержание метанола в 2–5 раз, и этого оказывалось недостаточно для достижения наблюдаемых обилий метанола в холодных плотных ядрах. Однако новая недиффузионная модель показывает наилучшее соответствие наблюдениям при отключённом туннелировании для диффузии атомов водорода.

Это не следует воспринимать как противоречие между диффузионными и недиффузионными моделями. Скорее, это отражение того, что макроскопические модели, основанные на уравнениях химической кинетики, имеют ограниченные возможности для воспроизведения микроскопических поверхностных эффектов, которые управляют диффузией атомов водорода. В серии детальных экспериментов авторы [92, 93] и [96] показали, что диффузия атомов водорода на реальной поверхности сложна и в основном контролируется наличием активных центров связывания с различной энергией. Туннелирование эффективно для диффузии между цен-

трами с низкой и средней энергией. Однако, если атом водорода попадёт в активный центр с высокой энергией, окружённый центрами с низкой и средней энергией, он останется захваченным. Таким образом, при низких температурах диффузия атомов водорода происходит быстро, но преимущественно на короткие расстояния, и ответ на вопрос, насколько влияет туннелирование на реакционную способность атомов водорода, зависит от того, насколько далеко в среднем находится ближайший потенциальный реагент, то есть от доли покрытия поверхности атомами водорода. При переводе в макроскопические модели, основанные на уравнениях химической кинетики, может оказаться, что скорость диффузии атомов водорода, необходимая для объяснения наблюдаемых содержаний, будет выше, чем обусловленная тепловой диффузией, но ниже, чем обусловленная квантовым туннелированием.

Наше моделирование показывает, что H_2CO образуется преимущественно в газовой фазе в реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$. Однако РД в поверхностной реакции $\text{gH} + \text{gHCO} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$ из цепочки образования метанола также существенна; на ранних временах (примерно до 2×10^4 лет) скорость обогащения газа формальдегидом по этому пути сравнима со скоростью реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$, а иногда даже несколько выше. Если реакция $\text{CH}_3 + \text{O}$ в модели выключена, значительное количество формальдегида поставляется в газовую фазу за счёт РД (и формальдегида в газе оказывается всё ещё несколько больше, чем метанола).

Недиффузионные механизмы вносят незначительный вклад в образование gH_2CO . В основном gH_2CO образуется в диффузионной реакции $\text{gH} + \text{gHCO}$, при этом скорость аналогичной недиффузионной реакции на 1–2 порядка ниже. Недиффузионная химия помогает объяснить образование СОМ путём рекомбинации малоподвижных свободных радикалов — например, рекомбинации радикалов CH_nO , образующихся в цепочке гидрирования $\text{CO} + 4\text{H} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$ [15, 166]. Формальдегид находится в сере-

дине этой цепочки. Таким образом, картирование H_2CO помогает понять общую картину: если бы не было недиффузионной химии, весь поверхностный gHCO был бы потрачен на образование gH_2CO , а не COM , поскольку диффузионные реакции между тяжёлыми радикалами протекают медленно.

Одномерное моделирование химии в рассматриваемых ядрах достаточно хорошо воспроизводит радиальные распределения наблюдаемых содержаний CO , H_2CO и CH_3OH . Однако, как видно на рисунках 3.3 и 3.4, теоретические содержания этих компонентов отклоняются от наблюдательных наборов точек. Как базовая модель MONACO , так и модель с дополнительным каналом имеют тенденцию занижать содержание CO и CH_3OH в газовой фазе. Причина этого может быть связана с содержанием углерода [72] или с тем, что модель не учитывает содержание CO в окружающем ядро облаке на луче зрения. В случае метанола ключевой фактор, влияющий на его содержание в газовой фазе холодных плотных ядер, — нетермальная (реактивная) десорбция, для которой нет однозначного определённых выражений. Однако имеющееся согласие с наблюдениями можно считать удовлетворительным. Детальное рассмотрение того, как содержания элементов и эффективность нетермальной десорбции влияют на содержания CO и CH_3OH , выходит за рамки данного исследования. В случае H_2CO базовая модель MONACO , напротив, завышала его содержание на порядок, независимо от эффективности его РД. Введение нового коэффициента ветвления между каналами газофазной реакции $\text{O} + \text{CH}_3$ позволило улучшить согласие модели с данными наблюдений. Это можно рассматривать как случай ограничения путей химической реакции по астрономическим наблюдениям при отсутствии необходимых лабораторных и расчётных данных о скорости реакции. Согласно нашим модельным тестам, содержание формальдегида не зависит от содержания кислорода, общей металличности, атомарного содержания C и O в начале эволюции ядра,

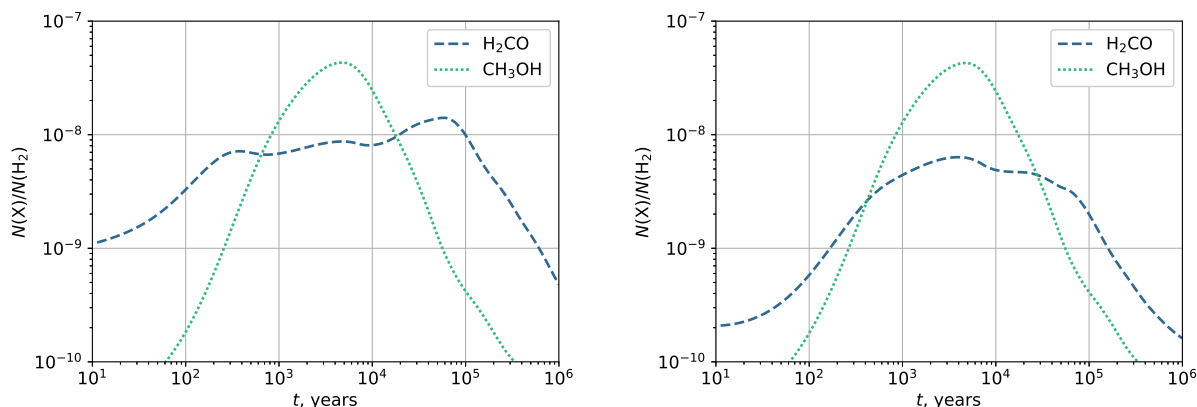


Рис. 3.6. Временные профили содержаний H_2CO и CH_3OH , полученные из модельных лучевых концентраций, в направлении на центр ядра 1 в базовой модели (слева) и в модели с дополнительным каналом (справа).

а также от понижения или повышения скорости ионизации космическими лучами (подробнее см. Приложение 3).

В обеих моделях — как базовой, так и с дополнительным каналом — в направлении на центры ядер метанол демонстрирует максимальное содержание $> 10^{-8}$ на момент $\approx 5 \times 10^3$ лет, что выше максимального содержания формальдегида в обоих случаях (см. пример ядра 1 на рисунке 3.6; для остальных ядер временные закономерности схожи). Для ядра 1 содержание CH_3OH преобладает над содержанием H_2CO на интервале 7×10^2 – 2×10^4 лет в базовой модели и на интервале 4×10^2 – 3×10^4 лет в модели с дополнительным каналом. Однако эти промежутки времени наступают раньше, чем ядро достигает своего химического возраста (110 тысяч лет), рассчитанного в соответствии со степенью вымораживания CO.

При высокой степени вымораживания CO, типичной для динамически эволюционирующих холодных плотных ядер, скорость адсорбции CO значительно снижается, что приводит к увеличению степени гидрирования CO за счёт постоянной адсорбции атомов H. В этом случае большая часть молекул CO, находящихся на поверхности пыли, может быть преобразована в конечный продукт гидрирования, CH_3OH , а не оказаться частично заключённой в лёд H_2CO . В результате образуется тонкий поверхностный

слоем, состоящий преимущественно из льда CH_3OH [77, 201].

Проблема завышенной оценки содержания H_2CO не уникальна для исследуемых ядер. Во многих химических моделях содержание формальдегида всегда превышает содержание метанола [4, 142, 171, 202], в то время как многие детальные наблюдательные исследования выявляют противоположные тенденции для всех типов областей звездообразования (за исключением областей фотодиссоциации) — маломассивных ядер, массивных ядер, инфракрасных тёмных облаков и т.д. [142, 174, 175, 202, 203]. Фактически, единственные источники, где наблюдалось преобладание формальдегида над метанолом, — это области фотодиссоциации [173, 174].

Можно предположить, что существенным источником неоднозначности в результатах моделирования являются скорости реакций. Действительно, в последнем выпуске базы данных UMIST [192] 1448 реакций имеют точность 25%, 802 реакции — 50%, 4631 реакция — фактор 2, 1854 реакции — порядок величины. Причина в том, что большинство газофазных реакций (как и реакция $\text{CH}_3 + \text{O}$) исследуются при комнатной температуре и выше, в то время как нам требуется моделировать среду с температурой около 10 К. Газофазные реакции сложно изучать в лаборатории: нейтральные частицы невозможно изолировать и охладить в ионной ловушке электрическими и/или магнитными полями. Такие реакции чаще всего исследуются с помощью перекрёстных пучков (cross-beams), а свободные радикалы обычно возникают в результате диссоциации, индуцированной электронами или фотонами, что делает образующиеся частицы горячими. Адиабатическое расширение охлаждает вещество, но охлаждение до 10 К затруднено. Из-за неопределённости скоростей реакций точность моделирования обилий составляет порядок величины [204–208]. Таким образом, мы считаем разницу в порядок величины между результатами наблюдений и наших моделей приемлемой. Однако мы полагаем, что случайные вариации скоростей реакций по-прежнему не объясняют систематическое

завышение отношения содержаний $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$.

3.4. Заключение по Главе 3

В данной главе обновлённая астрохимическая модель MONACO, включающая недиффузионную химию, применяется для анализа наблюдений формальдегида в семи холодных плотных ядрах волокна L1495. Основные выводы перечислены ниже.

- Хотя модели предсказывают обилие формальдегида на порядок выше, чем у метанола ($\sim 10^{-8}$ и $\sim 10^{-9}$ соответственно), наблюдаемое обилие формальдегида в 1–5 раз меньше, чем у метанола ($0.1\text{--}3.0 \times 10^{-9}$ против $0.5\text{--}8.5 \times 10^{-9}$). Тем не менее, наши модели воспроизводят форму распределения формальдегида. Воспроизведение наблюдаемых профилей в ходе моделирования обеспечивает хорошую общую валидацию применяемой астрохимической модели. С другой стороны, систематическое перепроизводство H_2CO в нашей модели указывает на систематическое завышение скорости образования H_2CO или систематическое занижение скорости его разрушения.
- В обновлённой модели MONACO самый эффективный способ приблизить смоделированные значения обилий к наблюдаемым — ввести новый канал у газофазной реакции $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{CO}$ [184], приводящей к образованию формальдегида. Мы накладываем на модель наблюдательное ограничение, применяя к продуктам этой реакции коэффициент ветвления $\text{HCO} + \text{H}_2 : \text{H}_2\text{CO} + \text{H} = 8 : 1$.
- Попытки добавить коллапс, повысить или понизить скорость ионизации космическими лучами, варьировать металличность (в том числе содержание серы и кислорода), атомарное содержание углерода и кислорода в начале эволюции ядра, скорости реакций в пределах, упомянутых в литературе, а также температуру газа в исходном

диффузном облаке не привели к значимому изменению соотношения $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$ в модели.

3.5. Положение, выносимое на защиту по результатам Главы 3

- Показано, что разработанная в диссертации недиффузионная версия кода MONACO воспроизводит форму радиального распределения содержания формальдегида в холодных плотных ядрах волокна L1495. Получить количественное согласие между теоретическим и наблюдаемым содержанием формальдегида можно при условии существования низкотемпературного канала у основной реакции синтеза формальдегида $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{CO}$ с коэффициентом ветвления для продуктов реакции $\text{HCO} + \text{H}_2 : \text{H}_2\text{CO} + \text{H} = 8 : 1$.

Заключение

В настоящей работе применялось численное моделирование химического состава в условиях, характерных для холодных плотных (в том числе дозвёздных) ядер и протопланетных дисков, с целью получить представление о процессах, происходящих в адсорбированном веществе и 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 сложных органических молекул 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 $E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$ помогло выяснить наиболее оптимальное отношение этих параметров. Варьирование параметров недиффузионной астрохимической модели и скоростей реакций, ответственных за образование и разрушение формальдегида, позволило выявить эффективный способ приблизить к на-

блюдаемому модельное обилие формальдегида и его отношение к обилию метанола.

Разработанные в диссертации методы могут применяться и в дальнейшем для моделирования химического состава объектов межзвёздной среды. В частности, можно проследить гравитационный коллапс дозвёздного ядра 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. Прогнозы содержаний компонентов в твёрдой фазе можно использовать для планирования наблюдений льдов в ИК-диапазоне, например, с помощью космического телескопа “Джеймс Уэбб” (JWST).

Благодарности

Соискатель выражает благодарность за плодотворное сотрудничество своему научному руководителю Дмитрию Вибе, научному консультанту Антону Васюнину, а также своим коллегам и соавторам, в частности, Анне Пунановой, Глебу Федосееву и Виталию Акимкину.

Литература

1. *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.
2. *Garrod & Pauly (2011)* On the Formation of CO₂ and Other Interstellar Ices // *Astrophys. J* — 2011. — V. 735. — Pp. 15.
3. *Garrod (2013)* A Three-phase Chemical Model of Hot Cores: The Formation of Glycine // *Astrophys. J* — 2013. — V. 765. — Pp. 60.
4. *Vasyunin, Caselli, Dulieu, & Jiménez-Serra (2017)* Formation of Complex Molecules in Prestellar Cores: A Multilayer Approach // *Astrophys. J* — 2017. — V. 842. — Pp. 33.
5. *Audard et al. (2014)* Episodic Accretion in Young Stars // *Protostars and Planets VI* — 2014. — Pp. 387-410.
6. *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.
7. *Jørgensen, Belloche, & Garrod (2020)* Astrochemistry During the Formation of Stars // *An. Rev. Astron. Astrophys* — 2020. — V. 58. — Pp. 727-778.
8. *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.

9. *Molyarova et al. (2018)* Chemical Signatures of the FU Ori Outbursts // *Astrophys. J* — 2018. — V. 866. — Pp. 46.
10. *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.
11. *Herbst & van Dishoeck (2009)* Complex Organic Interstellar Molecules // *An. Rev. Astron. Astrophys* — 2009. — V. 47. — Pp. 427-480.
12. *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.
13. *Skouteris et al. (2018)* The Genealogical Tree of Ethanol: Gas-phase Formation of Glycolaldehyde, Acetic Acid, and Formic Acid // *Astrophys. J* — 2018. — V. 854. — Pp. 135.
14. *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.
15. *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.
16. *Butscher, Duvernay, Danger, & Chiavassa (2016)* Radical-induced chemistry from VUV photolysis of interstellar ice analogues containing formaldehyde // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 593. — Pp. A60.
17. *Ioppolo et al. (2021)* A non-energetic mechanism for glycine formation in the interstellar medium // *Nature Astronomy* — 2021. — V. 5. — Pp. 197-205.

18. *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.
19. *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.
20. *Semenov & Wiebe (2011)* Chemical Evolution of Turbulent Protoplanetary Disks and the Solar Nebula // *Astrophys. J. Suppl* — 2011. — V. 196. — Pp. 25.
21. *Lee (2007)* Chemical Evolution in VeLLOs // *Journal of Korean Astronomical Society* — 2007. — V. 40. — Pp. 83-89.
22. *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.
23. *Öberg et al. (2011)* The Spitzer Ice Legacy: Ice Evolution from Cores to Protostars // *Astrophys. J* — 2011. — V. 740. — Pp. 109.
24. *Goto et al. (2018)* The first frost in the Pipe Nebula // *Astron. and Astrophys* — 2018. — V. 610. — Pp. A9.
25. *Boogert, Gerakines, & Whittet (2015)* Observations of the icy universe. // *An. Rev. Astron. Astrophys* — 2015. — V. 53. — Pp. 541-581.
26. *Molyarova et al. (2017)* Gas Mass Tracers in Protoplanetary Disks: CO is Still the Best // *Astrophys. J* — 2017. — V. 849. — Pp. 130.
27. *Lee et al. (1998)* Bistability in large chemical networks: a global view // *Astron. and Astrophys* — 1998. — V. 334. — Pp. 1047-1055.
28. *Clément et al. (2023)* Astrochemical models of interstellar ices: History matters // *Astron. and Astrophys* — 2023. — V. 675. — Pp. A165.

29. *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.
30. *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.
31. *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.
32. *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.
33. *Karssemeijer & Cuppen (2014)* Diffusion-desorption ratio of adsorbed CO and CO₂ on water ice // *Astron. and Astrophys* — 2014. — V. 569. — Pp. A107.
34. *Fredon et al. (2021)* Quantification of the Role of Chemical Desorption in Molecular Clouds // *Accounts of Chemical Research* — 2021. — V. 54. — Pp. 745-753.
35. *Marcelino et al. (2007)* Discovery of Interstellar Propylene (CH₂CHCH₃): Missing Links in Interstellar Gas-Phase Chemistry // *Astrophys. J. Let* — 2007. — V. 665. — Pp. L127-L130.
36. *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.

37. *Cernicharo et al. (2012)* Discovery of the Methoxy Radical, CH₃O, toward B1: Dust Grain and Gas-phase Chemistry in Cold Dark Clouds // *Astrophys. J. Let* — 2012. — V. 759. — Pp. L43.
38. *Crapsi et al. (2005)* Probing the Evolutionary Status of Starless Cores through N₂H⁺ and N₂D⁺ Observations // *Astrophys. J* — 2005. — V. 619. — Pp. 379-406.
39. *Keto & Caselli (2008)* The Different Structures of the Two Classes of Starless Cores // *Astrophys. J* — 2008. — V. 683. — Pp. 238-247.
40. *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.
41. *Nagy et al. (2019)* The chemical structure of the very young starless core L1521E // *Astron. and Astrophys* — 2019. — V. 630. — Pp. A136.
42. *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.
43. *Jiménez-Serra et al. (2021)* The Complex Organic Molecular Content in the L1498 Starless Core // *Astrophys. J* — 2021. — V. 917. — Pp. 44.
44. *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.
45. *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.
46. *Tafalla et al. (2002)* Systematic Molecular Differentiation in Starless Cores // *Astrophys. J* — 2002. — V. 569. — Pp. 815-835.

47. *Bizzocchi, Caselli, Spezzano, & Leonardo (2014)* Deuterated methanol in the pre-stellar core L1544 // *Astron. and Astrophys* — 2014. — V. 569. — Pp. A27.
48. *Keto & Caselli (2010)* Dynamics and depletion in thermally supercritical starless cores // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2010. — V. 402. — Pp. 1625-1634.
49. *Ruaud 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.
50. *Shingledecker, Tennis, Le Gal, & Herbst (2018)* On Cosmic-Ray-driven Grain Chemistry in Cold Core Models // *Astrophys. J* — 2018. — V. 861. — Pp. 20.
51. *Bergner, Öberg, & Rajappan (2017)* Methanol Formation via Oxygen Insertion Chemistry in Ices // *Astrophys. J* — 2017. — V. 845. — Pp. 29.
52. *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.
53. *McClure et al. (2023)* An Ice Age JWST inventory of dense molecular cloud ices // *Nature Astronomy* — 2023. — V. 7. — Pp. 431-443.
54. *Dartois et al. (2024)* Spectroscopic sizing of interstellar icy grains with JWST // *Nature Astronomy* — 2024. — V. 8. — Pp. 359-367.
55. *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.

56. *Jin et al. (2022)* Ice Age: Chemodynamical Modeling of Cha-MMS1 to Predict New Solid-phase Species for Detection with JWST // *Astrophys. J* — 2022. — V. 935. — Pp. 133.
57. *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.
58. *Minissale, Dulieu, Cazaux, & Hocuk (2016)* Dust as interstellar catalyst. I. Quantifying the chemical desorption process // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 585. — Pp. A24.
59. *Minissale & Dulieu (2014)* Influence of surface coverage on the chemical desorption process // *J. Chem. Phys.* — 2014. — V. 141. — Pp. 014304.
60. *Cazaux, Minissale, Dulieu, & Hocuk (2016)* Dust as interstellar catalyst. II. How chemical desorption impacts the gas // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 585. — Pp. A55.
61. *Garrod, Wakelam, & Herbst (2007)* Non-thermal desorption from interstellar dust grains via exothermic surface reactions // *Astron. and Astrophys* — 2007. — V. 467. — Pp. 1103-1115.
62. *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.
63. *Chuang et al. (2018)* Reactive Desorption of CO Hydrogenation Products under Cold Pre-stellar Core Conditions // *Astrophys. J* — 2018. — V. 853. — Pp. 102.

64. *Oba et al. (2018)* An infrared measurement of chemical desorption from interstellar ice analogues // *Nature Astronomy* — 2018. — V. 2. — Pp. 228-232.
65. *Furuya, Oba, & Shimonishi (2022)* Quantifying the Chemical Desorption of H₂S and PH₃ from Amorphous Water-ice Surfaces // *Astrophys. J* — 2022. — V. 926. — Pp. 171.
66. *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.
67. *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.
68. *Prasad & Tarafdar (1983)* UV radiation field inside dense clouds - Its possible existence and chemical implications // *Astrophys. J* — 1983. — V. 267. — Pp. 603-609.
69. *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.
70. *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.
71. *Fayolle et al. (2011)* CO Ice Photodesorption: A Wavelength-dependent Study // *Astrophys. J. Let* — 2011. — V. 739. — Pp. L36.

72. *Punanova et al. (2022)* Methanol Mapping in Cold Cores: Testing Model Predictions // *Astrophys. J* — 2022. — V. 927. — Pp. 213.
73. *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.
74. *Garrod (2008)* A new modified-rate approach for gas-grain chemical simulations // *Astron. and Astrophys* — 2008. — V. 491. — Pp. 239-251.
75. *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.
76. *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.
77. *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.
78. *Fuchs et al. (2009)* Hydrogenation reactions in interstellar CO ice analogues. A combined experimental/theoretical approach // *Astron. and Astrophys* — 2009. — V. 505. — Pp. 629-639.
79. *Hollenbach & McKee (1979)* Molecule formation and infrared emission in fast interstellar shocks. I. Physical processes. // *Astrophys. J. Suppl* — 1979. — V. 41. — Pp. 555-592.
80. *Jones & Williams (1985)* Time-dependent sticking coefficients and mantle growth on interstellar grains // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 1985. — V. 217. — Pp. 413-421.

81. *Oberg (2016)* Photochemistry and astrochemistry: photochemical pathways to interstellar complex organic molecules // *arXiv e-prints* — 2016. — Pp. arXiv:1609.03112.
82. *Kalvāns (2018)* The efficiency of photodissociation for molecules in interstellar ices // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2018. — V. 478. — Pp. 2753-2765.
83. *Paardekooper, Bossa, & Linnartz (2016)* Laser desorption time-of-flight mass spectrometry of vacuum UV photo-processed methanol ice // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 592. — Pp. A67.
84. *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.
85. *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.
86. *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.
87. *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.
88. *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.

89. *Caselli et al. (2019)* The Central 1000 au of a Pre-stellar Core Revealed with ALMA. I. 1.3 mm Continuum Observations // *Astrophys. J* — 2019. — V. 874. — Pp. 89.
90. *Redaelli et al. (2022)* A Large (≈ 1 pc) Contracting Envelope Around the Prestellar Core L1544 // *Astrophys. J* — 2022. — V. 941. — Pp. 168.
91. *Wakelam & Herbst (2008)* Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Dense Cloud Chemistry // *Astrophys. J* — 2008. — V. 680. — Pp. 371-383.
92. *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.
93. *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.
94. *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.
95. *Cuppen et al. (2017)* Grain Surface Models and Data for Astrochemistry // *Space Sci. Rev.* — 2017. — V. 212. — Pp. 1-58.
96. *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.
97. *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.

98. *Garrod, Park, Caselli, & Herbst (2006)* Are gas-phase models of interstellar chemistry tenable? The case of methanol // *Faraday Discussions* — 2006. — V. 133. — Pp. 51.
99. *Riedel et al. (2023)* Modelling deuterated isotopologues of methanol towards the pre-stellar core L1544 // *Astron. and Astrophys* — 2023. — V. 680. — Pp. A87.
100. *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.
101. *Santos et al. (2022)* First Experimental Confirmation of the $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{HCO}$ Reaction: Expanding the CH_3OH Formation Mechanism in Interstellar Ices // *Astrophys. J. Let* — 2022. — V. 931. — Pp. L33.
102. *Molpeceres et al. (2021)* Carbon Atom Reactivity with Amorphous Solid Water: H_2O Catalyzed Formation of H_2CO // *arXiv e-prints* — 2021. — Pp. arXiv:2110.15887.
103. *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.
104. *Ferrero et al. (2023)* Formation of Complex Organic Molecules on Interstellar CO Ices? Insights from Computational Chemistry Simulations // *Astrophys. J* — 2023. — V. 951. — Pp. 150.
105. *Papakondylis & Mavridis (2019)* Electronic Structure and Bonding of the Fastidious Species CN_2 and CP_2 : A First-Principles Study // *Journal of Physical Chemistry A* — 2019. — V. 123. — Pp. 10290-10302.

106. *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.
107. *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.
108. *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.
109. *Caselli et al. (1999)* CO Depletion in the Starless Cloud Core L1544 // *Astrophys. J. Let* — 1999. — V. 523. — Pp. L165-L169.
110. *Chacón-Tanarro et al. (2019)* Dust opacity variations in the pre-stellar core L1544 // *Astron. and Astrophys* — 2019. — V. 623. — Pp. A118.
111. *Punanova et al. (2018)* Seeds of Life in Space (SOLIS). III. Zooming Into the Methanol Peak of the Prestellar Core L1544 // *Astrophys. J* — 2018. — V. 855. — Pp. 112.
112. *Goto et al. (2021)* Water and methanol ice in L 1544 // *Astron. and Astrophys* — 2021. — V. 651. — Pp. A53.
113. *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.
114. *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.

115. *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.
116. *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.
117. *Douglas et al. (2022)* The Gas-phase Reaction of NH_2 with Formaldehyde (CH_2O) is not a Source of Formamide (NH_2CHO) in Interstellar Environments // *Astrophys. J. Let* — 2022. — V. 937. — Pp. L16.
118. *Fedoseev et al. (2016)* Simultaneous hydrogenation and UV-photolysis experiments of NO in CO-rich interstellar ice analogues; linking HNC, OCN^- , NH_2CHO , and NH_2OH // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2016. — V. 460. — Pp. 4297-4309.
119. *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.
120. *Oba et al. (2012)* Water Formation through a Quantum Tunneling Surface Reaction, $\text{OH} + \text{H}_2$, at 10 K // *Astrophys. J* — 2012. — V. 749. — Pp. 67.
121. *Qasim et al. (2019)* Extension of the HCOOH and CO_2 solid-state reaction network during the CO freeze-out stage: inclusion of H_2CO // *Astron. and Astrophys* — 2019. — V. 626. — Pp. A118.
122. *Li & Guo (2014)* A nine-dimensional global potential energy surface for $\text{NH}_4(\text{X}^2\text{A}_1)$ and kinetics studies on the $\text{H} + \text{NH}_3 \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{NH}_2$ reaction // *Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)* — 2014. — V. 16. — Pp. 6753.

123. *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.
124. *Ruffle & Herbst (2000)* New models of interstellar gas-grain chemistry - I. Surface diffusion rates // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2000. — V. 319. — Pp. 837-850.
125. *Ruaud, Wakelam, & Hersant (2016)* Gas and grain chemical composition in cold cores as predicted by the Nautilus three-phase model // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2016. — V. 459. — Pp. 3756-3767.
126. *Acharyya (2022)* Understanding the impact of diffusion of CO in the astrochemical models // *PASA* — 2022. — V. 39. — Pp. e009.
127. *Furuya et al. (2022)* Diffusion Activation Energy and Desorption Activation Energy for Astrochemically Relevant Species on Water Ice Show No Clear Relation // *Astrophys. J. Let* — 2022. — V. 933. — Pp. L16.
128. *He, Acharyya, & Vidali (2016)* Binding Energy of Molecules on Water Ice: Laboratory Measurements and Modeling // *Astrophys. J* — 2016. — V. 825. — Pp. 89.
129. *Grassi et al. (2020)* A novel framework for studying the impact of binding energy distributions on the chemistry of dust grains // *Astron. and Astrophys* — 2020. — V. 643. — Pp. A155.
130. *Furuya (2024)* A Framework for Incorporating Binding Energy Distribution in Gas-ice Astrochemical Models // *Astrophys. J* — 2024. — V. 974. — Pp. 115.
131. *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.

132. *Jørgensen et al. (2018)* The ALMA-PILS survey: isotopic composition of oxygen-containing complex organic molecules toward IRAS 16293-2422B // *Astron. and Astrophys* — 2018. — V. 620. — Pp. A170.
133. *López-Sepulcre et al. (2017)* Complex organics in IRAS 4A revisited with ALMA and PdBI: Striking contrast between two neighbouring protostellar cores // *Astron. and Astrophys* — 2017. — V. 606. — Pp. A121.
134. *Cazaux et al. (2003)* The Hot Core around the Low-mass Protostar IRAS 16293-2422: Scoundrels Rule! // *Astrophys. J. Let* — 2003. — V. 593. — Pp. L51-L55.
135. *Sutton et al. (1995)* The Distribution of Molecules in the Core of OMC-1 // *Astrophys. J. Suppl* — 1995. — V. 97. — Pp. 455.
136. *Ikeda et al. (2001)* Survey Observations of c-C₂H₄O and CH₃CHO toward Massive Star-forming Regions // *Astrophys. J* — 2001. — V. 560. — Pp. 792-805.
137. *Gieser et al. (2019)* Chemical complexity in high-mass star formation. An observational and modeling case study of the AFGL 2591 VLA 3 hot core // *Astron. and Astrophys* — 2019. — V. 631. — Pp. A142.
138. *Bianchi et al. (2019)* The census of interstellar complex organic molecules in the Class I hot corino of SVS13-A // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2019. — V. 483. — Pp. 1850-1861.
139. *Bottinelli, Ceccarelli, Williams, & Lefloch (2007)* Hot corinos in NGC 1333-IRAS4B and IRAS2A // *Astron. and Astrophys* — 2007. — V. 463. — Pp. 601-610.
140. *Lee et al. (2023)* Complex Organic Molecules in a Very Young Hot Corino, HOPS 373SW // *Astrophys. J* — 2023. — V. 956. — Pp. 43.

141. *Scibelli, Shirley, Megías, & Jiménez-Serra (2024)* Survey of complex organic molecules in starless and pre-stellar cores in the Perseus molecular cloud // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2024. — V. 533. — Pp. 4104-4149.
142. *Chacón-Tanarro et al. (2019)* Mapping deuterated methanol toward L1544. I. Deuterium fraction and comparison with modeling // *Astron. and Astrophys* — 2019. — V. 622. — Pp. A141.
143. *Spezzano et al. (2016)* Chemical differentiation in a prestellar core traces non-uniform illumination // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 592. — Pp. L11.
144. *Taquet et al. (2017)* Chemical complexity induced by efficient ice evaporation in the Barnard 5 molecular cloud // *Astron. and Astrophys* — 2017. — V. 607. — Pp. A20.
145. *Wirström et al. (2014)* Cold Water Vapor in the Barnard 5 Molecular Cloud // *Astrophys. J. Let* — 2014. — V. 788. — Pp. L32.
146. *Bacmann & Faure (2016)* The origin of gas-phase HCO and CH₃O radicals in prestellar cores // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 587. — Pp. A130.
147. *Lattanzi et al. (2020)* Molecular complexity in pre-stellar cores: a 3 mm-band study of L183 and L1544 // *Astron. and Astrophys* — 2020. — V. 633. — Pp. A118.
148. *He, Acharyya, & Vidali (2016)* Sticking of Molecules on Nonporous Amorphous Water Ice // *Astrophys. J* — 2016. — V. 823. — Pp. 56.
149. *Acharyya (2014)* Laboratory study of sticking and desorption of H₂ and its significance in the chemical evolution of dense interstellar medium // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2014. — V. 443. — Pp. 1301-1309.

150. *Veeraghattam, Manrodt, Lewis, & Stancil (2014)* The Sticking of Atomic Hydrogen on Amorphous Water Ice // *Astrophys. J* — 2014. — V. 790. — Pp. 4.
151. *Cazaux, Morisset, Spaans, & Allouche (2011)* When sticking influences H_2 formation // *Astron. and Astrophys* — 2011. — V. 535. — Pp. A27.
152. *Matar et al. (2010)* Gas temperature dependent sticking of hydrogen on cold amorphous water ice surfaces of interstellar interest // *J. Chem. Phys.* — 2010. — V. 133. — Pp. 104507-104507.
153. *Al-Halabi & van Dishoeck (2007)* Hydrogen adsorption and diffusion on amorphous solid water ice // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2007. — V. 382. — Pp. 1648-1656.
154. *Masuda & Takahashi (1997)* The sticking probability of a hydrogen atom on icy mantle // *Advances in Space Research* — 1997. — V. 19. — Pp. 1019-1022.
155. *Hollenbach & Salpeter (1970)* Surface Adsorption of Light Gas Atoms // *J. Chem. Phys.* — 1970. — V. 53. — Pp. 79-86.
156. *Bisschop et al. (2006)* Desorption rates and sticking coefficients for CO and N_2 interstellar ices // *Astron. and Astrophys* — 2006. — V. 449. — Pp. 1297-1309.
157. *Fuchs et al. (2006)* Comparative studies of O_2 and N_2 in pure, mixed and layered CO ices // *Faraday Discussions* — 2006. — V. 133. — Pp. 331.
158. *Öberg et al. (2005)* Competition between CO and N_2 Desorption from Interstellar Ices // *Astrophys. J. Let* — 2005. — V. 621. — Pp. L33-L36.
159. *Buch & Zhang (1991)* Sticking Probability of H and D Atoms on Amorphous Ice: A Computational Study // *Astrophys. J* — 1991. — V. 379. — Pp. 647.

160. *Dartois et al. (2018)* Cosmic ray sputtering yield of interstellar H₂O ice mantles. Ice mantle thickness dependence // *Astron. and Astrophys* — 2018. — V. 618. — Pp. A173.
161. *Dartois et al. (2020)* Non-thermal desorption of complex organic molecules. Cosmic-ray sputtering of CH₃OH embedded in CO₂ ice // *Astron. and Astrophys* — 2020. — V. 634. — Pp. A103.
162. *Dartois et al. (2021)* Cosmic ray sputtering yield of interstellar ice mantles. CO and CO₂ ice thickness dependence // *Astron. and Astrophys* — 2021. — V. 647. — Pp. A177.
163. *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.
164. *Boogert et al. (2008)* The c2d Spitzer Spectroscopic Survey of Ices around Low-Mass Young Stellar Objects. I. H₂O and the 5-8 μ m Bands // *Astrophys. J* — 2008. — V. 678. — Pp. 985-1004.
165. *Yang et al. (2022)* CORINOS. I. JWST/MIRI Spectroscopy and Imaging of a Class 0 Protostar IRAS 15398–3359 // *Astrophys. J. Let* — 2022. — V. 941. — Pp. L13.
166. *Chuang et al. (2016)* H-atom addition and abstraction reactions in mixed CO, H₂CO and CH₃OH ices — an extended view on complex organic molecule formation // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2016. — V. 455. — Pp. 1702-1712.
167. *Fedoseev et al. (2017)* Formation of Glycerol through Hydrogenation of CO Ice under Prestellar Core Conditions // *Astrophys. J* — 2017. — V. 842. — Pp. 52.

168. *Vastel, Ceccarelli, Lefloch, & Bachiller (2014)* The Origin of Complex Organic Molecules in Prestellar Cores // *Astrophys. J. Let* — 2014. — V. 795. — Pp. L2.
169. *Scibelli & Shirley (2020)* Prevalence of Complex Organic Molecules in Starless and Prestellar Cores within the Taurus Molecular Cloud // *Astrophys. J* — 2020. — V. 891. — Pp. 73.
170. *Sipilä, Zhao, & Caselli (2020)* Effect of grain size distribution and size-dependent grain heating on molecular abundances in starless and pre-stellar cores // *Astron. and Astrophys* — 2020. — V. 640. — Pp. A94.
171. *Chen, Chang, Wang, & Li (2022)* Complex organic molecules formation in cold cores on stochastically heated grains // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2022. — V. 516. — Pp. 4627-4639.
172. *Potapov & Garrod (2024)* Influence of the $C + H_2O \rightarrow H_2CO$ solid-state reaction on astrochemical networks and the formation of complex organic molecules // *Astron. and Astrophys* — 2024. — V. 692. — Pp. A252.
173. *Guzmán et al. (2013)* The IRAM-30 m line survey of the Horsehead PDR. IV. Comparative chemistry of H_2CO and CH_3OH // *Astron. and Astrophys* — 2013. — V. 560. — Pp. A73.
174. *Cuadrado et al. (2017)* Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas // *Astron. and Astrophys* — 2017. — V. 603. — Pp. A124.
175. *Kirsanova, Punanova, Semenov, & Vasyunin (2021)* Dark cloud-type chemistry in photodissociation regions with moderate ultraviolet field // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2021. — V. 507. — Pp. 3810-3829.
176. *Mercimek et al. (2022)* Chemical survey of Class I protostars with the IRAM-30 m // *Astron. and Astrophys* — 2022. — V. 659. — Pp. A67.

177. *Freeman et al. (2023)* Parsec scales of carbon chain and complex organic molecules in AFGL 2591 and IRAS 20126 // *Astron. and Astrophys* — 2023. — V. 678. — Pp. A18.
178. *Hiraoka et al. (1994)* Formation of formaldehyde and methanol from the reactions of H atoms with solid CO at 10-20 K // *Chemical Physics Letters* — 1994. — V. 229. — Pp. 408-414.
179. *Watanabe & Kouchi (2002)* Efficient Formation of Formaldehyde and Methanol by the Addition of Hydrogen Atoms to CO in H₂O-CO Ice at 10 K // *Astrophys. J. Let* — 2002. — V. 571. — Pp. L173-L176.
180. *Hidaka, Watanabe, Kouchi, & Watanabe (2009)* Reaction Routes in the CO-H₂CO-*d_n*-CH₃OH-*d_m* System Clarified from H(D) Exposure of Solid Formaldehyde at Low Temperatures // *Astrophys. J* — 2009. — V. 702. — Pp. 291-300.
181. *Minissale et al. (2016)* Hydrogenation of CO-bearing species on grains: unexpected chemical desorption of CO // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2016. — V. 458. — Pp. 2953-2961.
182. *Baulch et al. (2005)* Evaluated Kinetic Data for Combustion Modeling: Supplement II // *Journal of Physical and Chemical Reference Data* — 2005. — V. 34. — Pp. 757-1397.
183. *Hack et al. (2005)* Mechanism and rate of the reaction CH₃ + O — revisited // *Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)* — 2005. — V. 7. — Pp. 1977.
184. *Xu, Raghunath, & Lin (2015)* Ab Initio Chemical Kinetics for the CH₃ + O(³P) Reaction and Related Isomerization-Decomposition of CH₃O and CH₂OH Radicals // *Journal of Physical Chemistry A* — 2015. — V. 119. — Pp. 7404-7417.

185. *Schlafly et al. (2014)* A Large Catalog of Accurate Distances to Molecular Clouds from PS1 Photometry // *Astrophys. J* — 2014. — V. 786. — Pp. 29.
186. *Roccatagliata et al. (2020)* A 3D view of the Taurus star-forming region by Gaia and Herschel. Multiple populations related to the filamentary molecular cloud // *Astron. and Astrophys* — 2020. — V. 638. — Pp. A85.
187. *Hasenberger & Alves (2020)* AVIATOR: Morphological object reconstruction in 3D. An application to dense cores // *Astron. and Astrophys* — 2020. — V. 633. — Pp. A132.
188. *Hacar, Tafalla, Kauffmann, & Kovács (2013)* Cores, filaments, and bundles: hierarchical core formation in the L1495/B213 Taurus region // *Astron. and Astrophys* — 2013. — V. 554. — Pp. A55.
189. *Seo et al. (2015)* An Ammonia Spectral Map of the L1495-B218 Filaments in the Taurus Molecular Cloud. I. Physical Properties of Filaments and Dense Cores // *Astrophys. J* — 2015. — V. 805. — Pp. 185.
190. *Kimura et al. (2018)* Measurements of the Activation Energies for Atomic Hydrogen Diffusion on Pure Solid CO // *Astrophys. J. Let* — 2018. — V. 858. — Pp. L23.
191. *Wakelam et al. (2012)* A KInetic Database for Astrochemistry (KIDA) // *Astrophys. J. Suppl* — 2012. — V. 199. — Pp. 21.
192. *Millar, Walsh, Van de Sande, & Markwick (2024)* The UMIST Database for Astrochemistry 2022 // *Astron. and Astrophys* — 2024. — V. 682. — Pp. A109.
193. *Baulch et al. (1992)* Evaluated Kinetic Data for Combustion Modelling // *Journal of Physical and Chemical Reference Data* — 1992. — V. 21. — Pp. 411-734.

194. *Fockenberg & Preses (2002)* Temperature Dependence of the Rate Constant and Product Distribution of the Reaction of CH₃ Radicals with O(³P) Atoms // *Journal of Physical Chemistry A* — 2002. — V. 106. — Pp. 2924-2930.
195. *Atkinson et al. (2006)* Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: Volume II – gas phase reactions of organic species // *Atmospheric Chemistry & Physics* — 2006. — V. 6. — Pp. 3625-4055.
196. *Hébrard et al. (2009)* How Measurements of Rate Coefficients at Low Temperature Increase the Predictivity of Photochemical Models of Titan's Atmosphere // *Journal of Physical Chemistry A* — 2009. — V. 113. — Pp. 11227-11237.
197. *Yagi, Takayanagi, Taketsugu, & Hirao (2004)* The effect of spin-orbit coupling on fast neutral chemical reaction O(³P)+CH₃→CH₃O // *J. Chem. Phys.* — 2004. — V. 120. — Pp. 10395-10403.
198. *Fockenberg et al. (1999)* Kinetics and Product Study of the Reaction of CH₃ Radicals with O(³P) Atoms Using Time Resolved Time-of-Flight Spectrometry // *Journal of Physical Chemistry A* — 1999. — V. 103. — Pp. 5722-5731.
199. *Preses, Fockenberg, & Flynn (2000)* A Measurement of the Yield of Carbon Monoxide from the Reaction of Methyl Radicals and Oxygen Atoms // *Journal of Physical Chemistry A* — 2000. — V. 104. — Pp. 6758-6763.
200. *Yocum et al. (2023)* Gas-phase Ortho-to-para Ratio of Formaldehyde Formed at Low Temperatures in Laboratory Ices // *Astrophys. J. Let* — 2023. — V. 958. — Pp. L41.
201. *He et al. (2022)* Methoxymethanol formation starting from CO hydrogenation // *Astron. and Astrophys* — 2022. — V. 659. — Pp. A65.

202. *Walsh, Harada, Herbst, & Millar (2009)* The Effects of Molecular Anions on the Chemistry of Dark Clouds // *Astrophys. J* — 2009. — V. 700. — Pp. 752-761.
203. *Vasyunina et al. (2014)* Organic Species in Infrared Dark Clouds // *Astrophys. J* — 2014. — V. 780. — Pp. 85.
204. *Vasyunin, Sobolev, Wiebe, & Semenov (2004)* Influence of Uncertainties in the Rate Constants of Chemical Reactions on Astrochemical Modeling Results // *Astronomy Letters* — 2004. — V. 30. — Pp. 566-576.
205. *Vasyunin et al. (2008)* Chemistry in Protoplanetary Disks: A Sensitivity Analysis // *Astrophys. J* — 2008. — V. 672. — Pp. 629-641.
206. *Wakelam, Selsis, Herbst, & Caselli (2005)* Estimation and reduction of the uncertainties in chemical models: application to hot core chemistry // *Astron. and Astrophys* — 2005. — V. 444. — Pp. 883-891.
207. *Wakelam, Herbst, & Selsis (2006)* The effect of uncertainties on chemical models of dark clouds // *Astron. and Astrophys* — 2006. — V. 451. — Pp. 551-562.
208. *Wakelam et al. (2010)* Reaction Networks for Interstellar Chemical Modelling: Improvements and Challenges // *Space Sci. Rev.* — 2010. — V. 156. — Pp. 13-72.
209. *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.
210. *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.

211. *Allen & Robinson (1977)* The molecular composition of dense interstellar clouds. // *Astrophys. J* — 1977. — V. 212. — Pp. 396-415.
212. *Lamberts, Markmeyer, Kolb, & Kästner (2019)* Formation of Acetaldehyde on CO-Rich Ices // *ACS Earth and Space Chemistry* — 2019. — V. 3. — Pp. 958-963.
213. *Warnatz (1984)* Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation // *Springer, New York* — 1984. — Pp. 209.
214. *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.
215. *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.
216. *Lamberts et al. (2022)* Methane Formation in Cold Regions from Carbon Atoms and Molecular Hydrogen // *Astrophys. J* — 2022. — V. 928. — Pp. 48.
217. *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.
218. *Padovani, Marcowith, Hennebelle, & Ferrière (2016)* Protostars: Forges of cosmic rays? // *Astron. and Astrophys* — 2016. — V. 590. — Pp. A8.
219. *Fontani et al. (2017)* Seeds of Life in Space (SOLIS). I. Carbon-chain growth in the Solar-type protocluster OMC2-FIR4 // *Astron. and Astrophys* — 2017. — V. 605. — Pp. A57.

220. *Cabedo et al. (2023)* Magnetically regulated collapse in the B335 protostar? II. Observational constraints on gas ionization and magnetic field coupling // *Astron. and Astrophys* — 2023. — V. 669. — Pp. A90.
221. *Harju et al. (2017)* Deuteration of ammonia in the starless core Ophiuchus/H-MM1 // *Astron. and Astrophys* — 2017. — V. 600. — Pp. A61.
222. *Pagani et al. (2003)* Low upper limits on the O₂ abundance from the Odin satellite // *Astron. and Astrophys* — 2003. — V. 402. — Pp. L77-L81.
223. *Melnick & Bergin (2005)* The legacy of SWAS: Water and molecular oxygen in the interstellar medium // *Advances in Space Research* — 2005. — V. 36. — Pp. 1027-1030.
224. *Olofsson (2006)* An Orion KL Survey with the Odin sub mm satellite // *Complex Molecules in Space: Present Status and Prospects with ALMA* — 2006. — V. . — Pp. 6.
225. *Larsson et al. (2007)* Molecular oxygen in the ρ Ophiuchi cloud // *Astron. and Astrophys* — 2007. — V. 466. — Pp. 999-1003.
226. *Rawlings, Hartquist, Menten, & Williams (1992)* Direct diagnosis of infall in collapsing protostars - I. The theoretical identification of molecular species with broad velocity distributions. // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 1992. — V. 255. — Pp. 471-485.
227. *Komichi, Aikawa, Iwasaki, & Furuya (2024)* Chemical evolution during molecular cloud formation triggered by an interstellar shock wave: dependence on shock parameters and comparison with molecular absorption lines // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2024. — V. 535. — Pp. 3738-3757.

228. *Belloche, Garrod, Müller, & Menten (2014)* Detection of a branched alkyl molecule in the interstellar medium: iso-propyl cyanide // *Science* — 2014. — V. 345. — Pp. 1584-1587.
229. *Herron (1988)* Evaluated Chemical Kinetic Data for the Reactions of Atomic Oxygen O(³P) with Saturated Organic Compounds in the Gas Phase // *Journal of Physical and Chemical Reference Data* — 1988. — V. 17. — Pp. 967-1026.
230. *Machado et al. (2020)* Prediction of Rate Coefficients for the H₂CO + OH → HCO + H₂O Reaction at Combustion, Atmospheric and Interstellar Medium Conditions // *The Journal of Physical Chemistry A* — 2020. — V. 124. — Pp. 2309-2317.
231. *Ocaña et al. (2017)* Is the Gas-phase OH+H₂CO Reaction a Source of HCO in Interstellar Cold Dark Clouds? A Kinetic, Dynamic, and Modeling Study // *Astrophys. J* — 2017. — V. 850. — Pp. 28.
232. *Yu, Yang, & Lin (1993)* Kinetics of CN radical reactions with formaldehyde and 1,3,5-trioxane // *International Journal of Chemical Kinetics* — 1993. — V. 25. — Pp. 1053-1064.
233. *Cimas & Largo (2006)* The Reaction of Nitrogen Atoms with Methyl Radicals: Are Spin-Forbidden Channels Important? // *Journal of Physical Chemistry A* — 2006. — V. 110. — Pp. 10912-10920.
234. *Loison, Wakelam, & Hickson (2014)* The interstellar gas-phase chemistry of HCN and HNC // *Monthly Notices Roy. Astron. Soc* — 2014. — V. 443. — Pp. 398-410.
235. *Jasper, Klippenstein, Harding, & Ruscic (2007)* Kinetics of the Reaction of Methyl Radical with Hydroxyl Radical and Methanol Decomposition // *Journal of Physical Chemistry A* — 2007. — V. 111. — Pp. 3932-3950.

Приложение 1

Таблица 4.1: Содержания в конце стадии молекулярного облака. Компоненты, различие содержаний которых в двух- и трёхфазной моделях превышает порядок величины. Запись $a(b)$ здесь и далее обозначает $a \times 10^b$.

Компонент	2 Ph	3 Ph	Компонент	2 Ph	3 Ph
CH ₃ OH	4.4(−11)	2.9(−9)	iCH ₂ CN	4.7(−16)	8.7(−9)
CH ₃ OH ⁺	1.0(−13)	6.9(−12)	iCH ₂	1.3(−17)	1.1(−10)
C ₃ H ₃ N	4.3(−11)	3.4(−12)	iCH ₂ NH	4.3(−17)	5.3(−9)
C ₄ H ₄	6.7(−12)	2.1(−13)	iCH ₂ NH ₂	2.2(−17)	2.0(−9)
C ₇ H ₄	1.9(−12)	1.4(−13)	iNH ₂	8.4(−14)	1.8(−7)
C ₈ H ₄	1.1(−12)	9.2(−14)	iCH ₂ OH	1.1(−15)	2.7(−8)
CH ₂ NH ₂	1.6(−11)	2.2(−10)	iOH	5.7(−13)	1.6(−6)
CH ₂ OH	6.0(−11)	4.0(−9)	iCH ₃	7.5(−16)	1.3(−8)
CH ₃ NH	1.6(−11)	2.2(−10)	iHCO	2.6(−14)	5.0(−10)
H ₅ C ₃ N	3.1(−11)	1.0(−12)	iCH ₃ NH	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					

<i>продолжение</i>					
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)
<i>продолжение следует</i>					

продолжение					
Компонент	2 Ph	3 Ph	Компонент	2 Ph	3 Ph
iC ₉ H	1.9(−20)	7.7(−12)	iC ₂ H ₅ ОН	4.3(−14)	5.3(−11)
iC ₉ H ₂	1.5(−12)	8.2(−11)			

В таблице 4.2 даны газофазные и некоторые адсорбированные компоненты, различие содержаний которых в двух- и трёхфазной моделях превышает порядок величины. Для внутренней области представлены все адсорбированные компоненты, обладающие указанным свойством, для остальных областей — длинные углеродные цепочки gC_xH_4 и соединения, подробно рассмотренные в [8]. **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 iNH₂CHO), 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.

Таблица 4.2: Газофазные и избранные адсорбированные компоненты, различие содержаний которых в двух- и трёхфазной моделях превышает порядок величины. Выделение шрифтом: см. текст.

Внутренняя область

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
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

Промежуточная область

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отн-е после/до	
	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
продолжение следует						

Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		Отн-е после/до	
	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
CO	1.1(−11)	7.5(−13)	1.1(−11)	1.6(−12)	1.0	2.1
N	1.9(−12)	6.7(−14)	1.9(−12)	2.9(−12)	1.0	42.6
NO	1.3(−12)	6.8(−13)	1.2(−12)	6.7(−14)	1.0	0.1
HNO	1.3(−12)	6.9(−13)	1.3(−12)	7.0(−14)	1.0	0.1
NH ₂	1.4(−12)	5.3(−14)	1.4(−12)	2.2(−12)	1.0	42.1
O ₂	5.4(−16)	1.1(−11)	4.1(−15)	4.3(−8)	7.5	3904
NH	2.9(−12)	1.1(−13)	2.9(−12)	3.6(−12)	1.0	32.8
H ₂ O ₂	5.9(−19)	5.5(−15)	5.9(−19)	1.3(−12)	1.0	240
N ₂	3.2(−7)	2.4(−9)	3.2(−7)	1.3(−6)	1.0	542
O ₂ H	6.2(−19)	5.4(−15)	7.1(−19)	1.4(−12)	1.2	252

продолжение следует

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
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
iC ₈ H ₄	2.8(−10)	2.8(−11)	2.8(−10)	2.8(−11)	1.0	1.0
iC ₉ H ₄	1.2(−10)	1.1(−11)	1.2(−10)	1.1(−11)	1.0	1.0
iCH ₃ OH	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

[illegible]

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
C_3H_4	3.0(−12)	2.7(−13)	3.8(−12)	3.6(−12)	1.3	13.3
C_4H_2	7.2(−14)	1.5(−14)	2.4(−13)	6.8(−12)	3.3	460
CH_2CO	6.5(−18)	8.4(−18)	7.1(−13)	8.1(−12)	1.1(5)	9.6(5)
CH_3OH	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_2N	5.6(−15)	8.4(−16)	4.5(−13)	5.8(−12)	79.6	6968
C_2O	1.1(−17)	1.8(−17)	6.7(−14)	1.9(−12)	5841	1.1(5)
C_2S	5.7(−18)	1.8(−17)	3.6(−15)	2.2(−12)	633	1.2(5)
C_3H_3N	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_4H	1.8(−14)	4.6(−15)	1.3(−13)	4.0(−12)	7.4	864
C_4H_3	2.3(−13)	1.9(−14)	2.5(−13)	8.2(−12)	1.1	433
продолжение следует						

продолжение						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
C₅H₂	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)
CH₂OH	7.8(−13)	1.9(−11)	6.2(−13)	3.1(−13)	0.8	2(−2)
H₂CO	6.9(−12)	4.9(−11)	8.6(−12)	9.5(−11)	1.3	1.9
CO₂	4.5(−11)	4.2(−14)	6.9(−11)	4.1(−10)	1.51	9534
H₂CS	9.5(−14)	7.7(−15)	1.9(−13)	1.2(−11)	2.0	1602
H₂O₂	2.2(−16)	9.5(−14)	1.5(−16)	7.6(−12)	0.7	80
HC₂O	1.2(−19)	3.2(−18)	1.8(−15)	1.1(−11)	1.6(4)	3.6(6)
HC₃O	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)
N₂O	1.8(−13)	4.0(−14)	2.2(−13)	1.4(−11)	1.3	353
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)
продолжение следует						

<i>продолжение</i>						
Компонент	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph	2 Ph	3 Ph
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

Полный список адсорбированных компонентов, содержания которых в двух- и трёхфазной моделях отличаются более, чем на порядок величины, а также список общих потенциальных индикаторов вспышек светимости для двух- и трёхфазной моделей доступны в сети Интернет по адресу https://disk.yandex.ru/i/AwaJQy_flq3lAA.

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
<i>i</i> C ₉	2.8(−12)	2.3(−12)	1.4(−13)	2.8(−13)	0.05	0.1
iCH₃C₄H	2.7(−12)	7.2(−13)	1.3(−11)	2.8(−11)	4.8	38.6

$E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$	0.5	0.3	0.5	0.3	0.5	0.3
Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		После/до	
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	
iH_2CO	1.9(−09)	5.0(−11)	6.1(−11)	4.5(−11)	0.03	0.89
iH₂SiO	4.2(−13)	3.8(−13)	1.7(−12)	5.0(−12)	3.9	13.1

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	
iH_2O_2	6.6(−08)	3.3(−07)	9.9(−07)	1.6(−06)	14.9	5.0
iOCN	1.5(−08)	2.7(−08)	9.9(−09)	1.9(−10)	0.64	7.2(−3)
iC_2N	1.2(−08)	1.2(−08)	4.7(−10)	3.0(−09)	0.04	0.25
iNH_2CHO	2.8(−09)	1.0(−07)	5.7(−07)	7.1(−07)	206.6	7.1
iC_2O	1.8(−09)	2.8(−09)	2.6(−08)	1.7(−08)	14.5	6.2
iC_5	4.7(−10)	4.2(−10)	5.7(−09)	2.7(−09)	12.0	6.4
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

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	
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
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

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	
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
<i>CH₃OH</i>	2.0(−11)	4.2(−12)	1.1(−12)	5.4(−12)	0.05	1.3
<i>CH₂OH</i>	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
<i>iO₂</i>	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)

$E_{\text{diff}}/E_{\text{des}}$	0.5	0.3	0.5	0.3	0.5	0.3
Компонент	Перед вспышкой		500 лет спустя		После/до	
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
<i>iC₂S</i>	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
<i>HNO⁺</i>	3.2(−13)	8.7(−13)	1.8(−11)	1.6(−12)	57.2	1.9
<i>iHCS</i>	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
<i>iCH</i>	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)

Приложение 2

В данном приложении описаны дополнительные модификации, внедрённые нами в сетку реакций астрохимического кода MONACO.

Недавно в работе [102] было показано, что формальдегид (H_2CO) — молекула, которая на пыли может конвертироваться в метанол двумя последовательными присоединениями атома водорода, — способна образовываться 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 [109], 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.

В работе [4] ацетальдегид преимущественно образовывался 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 [209], однако там они были получены при высоких температурах (298–753 К) и давлениях (100–600 торр), что далеко от условий, 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 [191] с пометкой о происхождении из газофазно-поверхностного кода OSU группы Эрика Хербста от 2006 года, это, вероятно, неэффективный путь производства твердофазного 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 [4] использовались константы скорости, предложенные в [210]. Однако в недавней работе [117] высказано предпо-

Таблица 5.1. Реакции абстракции водорода для СОМ. Энергии активации E_{act} приведены по [3, 14]. Внутри даны ссылки на источники, упомянутые в данных работах.

Реакция	E_{act} , К
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{CHO} \rightarrow \text{gH}_2 + \text{gCH}_3\text{CO}$	2120 [213]
$\text{gH} + \text{gCH}_3\text{OCH}_3 \rightarrow \text{gCH}_3\text{OCH}_2 + \text{gH}_2$	4450 [214]
$\text{gH} + \text{gHCOOCH}_3 \rightarrow \text{gH}_2 + \text{gCH}_3\text{OCO}$	3970 [215]

ложение, что при температуре ниже 110 К вероятность данного канала реакции эффективно равна нулю, поэтому в текущей сетке эта реакция исключена.

Эффективные недиффузионные пути образования метилформиата, диметилового эфира и ацетальдегида — радикал-радикальные реакции 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 $\text{CH}_3 + \text{HCO} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO}$ [211], хотя в последней из них возможны и другие продукты [212]. Согласно [14], в сетку также были добавлены петли присоединения/абстракции водорода для этих СОМ. Барьеры для реакций абстракции водорода (E_{act}) взяты из [3] и [14] (таблица 5.1); см. также [100]. Реакции присоединения водорода, в результате которых формируются упомянутые СОМ, не имеют барьеров активации. Петли присоединения и абстракции водорода могут усилить общую эффективность РД благодаря итеративным актам десорбции продукта в результате реакций присоединения водорода.

В [216] было показано, что наряду с реакциями присоединения атомарного водорода [217] реакции с молекулярным водородом также важны для гидрирования атомов углерода до метана на межзвёздных пылинках. Барьеры активации в настоящей модели обновлены согласно результатам [216] (см. таблицу 5.2). В [216] 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

Таблица 5.2. Реакции образования льда CH_4 и их энергии активации E_{act} .

Реакция	E_{act} , K
$\text{gC} + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}$	0
$\text{gCH} + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_2$	0
$\text{gCH}_2 + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_3$	0
$\text{gCH}_3 + \text{gH} \rightarrow \text{gCH}_4$	0
$\text{gC} + \text{gH}_2 \rightarrow \text{gCH}_2$	3600
$\text{gCH} + \text{gH}_2 \rightarrow \text{gCH}_3$	0
$\text{gCH}_2 + \text{gH}_2 \rightarrow \text{gCH}_3 + \text{H}$	5900
$\text{gCH}_3 + \text{gH}_2 \rightarrow \text{gCH}_4 + \text{H}$	5300

молекулы воды. В нашей модели выбрана минимальная энергия связи из предложенных в [216], равная 30 кДж/моль (3600 K).

В предыдущих моделях формирования СОМ в холодных облаках [4, 12] 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 работах [4] и [12] скорость данной реакции при 10 K была принята равной $3 \times 10^{-10} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$. Однако недавно в [113] 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 константы 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 [113] утверждают, что они более точны. Их значения таковы: $\alpha = 1.37 \times 10^{-12} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$, $\beta = -0.96$, $\gamma = 0.00$. В этом случае коэффициент скорости реакции при 10 K оказывается равен $3.6 \times 10^{-11} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$, что почти на порядок ниже значения из [4].

Приложение 3

Здесь представлены попытки модифицировать недиффузионную модель MONACO, чтобы изменить соотношение формальдегида и метанола, которые не дали желаемого результата. Варьировались скорость ионизации космическими лучами, скорости реакций, металличность и содержание кислорода, атомарные содержания углерода и кислорода в начале эволюции ядра, а также был введён гравитационный коллапс и добавлено несколько реакций.

Скорость ионизации космическими лучами. Известно, что скорость ионизации космическими лучами может изменяться в областях звездообразования — возможно, из-за ускорения энергичных частиц в потоках, идущих вдоль молодых звёздных объектов [218–220]. В базовой модели мы проварьировали скорость ионизации космическими лучами: $\zeta = 1.3 \times 10^{-16} \text{ с}^{-1}$, $1.3 \times 10^{-17} \text{ с}^{-1}$, $1.3 \times 10^{-18} \text{ с}^{-1}$. При $\zeta = 1,3 \times 10^{-16} \text{ с}^{-1}$ на момент, соответствующий наблюдаемой степени вымораживания CO, полученные содержания CH_3OH и H_2CO отличаются в $\leq 1,5$ раза от их содержаний в базовой модели. При $\zeta = 1,3 \times 10^{-18} \text{ с}^{-1}$ содержание CH_3OH падает вдвое в центре ядра и не изменяется во внешних его областях, а содержание H_2CO падает втрое по всему радиусу. Таким образом, отношение содержаний H_2CO и CH_3OH по-прежнему остаётся высоким.

Варьирование содержания кислорода и металличности. Некоторые из последних исследований [42, 221] предполагают, что химическое моделирование холодных плотных ядер в локальной межзвёздной среде может потребовать более высокого изначального элементного содержания азота или серы, чем стандартный “низкометаллический” набор EA1 [91]. В то же время попытки обнаружить O_2 с помощью спутника ODIN в областях звез-

дообразования [222–225] показали, что содержание кислорода может быть значительно ниже ожидаемого ($\chi(O_2) : \chi(H_2) = 5 \times 10^{-8}$).

Содержание атомарного кислорода было проварьировано в модели от 5×10^{-4} до 10^{-4} с шагом 10^{-4} и от 9×10^{-5} до 5×10^{-5} с шагом 10^{-5} (в EA1 $\chi(O) = 1.76 \times 10^{-4}$), при этом другие начальные содержания элементов соответствовали “низкометаллическому” EA1 [91]. Однако ни высокое, ни низкое начальное содержание кислорода не снижает отношение содержаний $H_2CO : CH_3OH$. В центре ядра максимальное содержание H_2CO составляет 1.1×10^{-8} при содержании кислорода 9×10^{-5} . Увеличение или уменьшение обилия кислорода в указанном диапазоне снижает обилие H_2CO в ≤ 1.5 раза. Что касается CH_3OH , в центре ядра его максимальное содержание составляет 3.5×10^{-10} при содержании кислорода 2×10^{-4} . Увеличение или уменьшение содержания кислорода в указанном диапазоне снижает содержание CH_3OH в ≤ 1.1 раза в центре ядра и более чем на порядок на краю ядра.

Если использовать начальное “высокометаллическое” содержание EA2 [91], то в центре ядра содержание H_2CO падает до 3.2×10^{-9} , но также падает и содержание CH_3OH до 4.1×10^{-11} . Изменение начального содержания кислорода (и сохранение других начальных обилий “высокометаллическими”) не приводит к уменьшению отношения содержаний H_2CO и CH_3OH .

Модель с коллапсом. Статические модели ограничены, и иногда для адекватного воспроизведения химических процессов требуется моделирование коллапса облака. Мы включили коллапс в нашу модель, как он определён в [226]. Помимо коллапса свободного падения (с параметром $B = 1$), мы сделали расчёты для быстрого ($B = 5, 10, 100$) и медленного ($B = 0.3$) коллапса. Также мы запустили коллапс с понижением температуры, как это было сделано в [2] и [A2]. В последнем случае температура на стадии полупрозрачного облака оставалась постоянной (15 K).

Свободный коллапс ($B = 1$) и коллапс при $B = 0.3$ приводят к обратному радиальному профилю CH_3OH — его содержание падает к краю ядра, что противоречит наблюдениям. Модели с более высоким B не изменяют профиль содержания CH_3OH . Ни одна из моделей с коллапсом не производит меньше H_2CO , чем CH_3OH , на момент, соответствующий наблюдаемой степени вымораживания CO .

Одной из целей внедрения коллапса была проверка нашего предположения, что при химическом возрасте холодных плотных ядер, типичном для статических моделей ($\sim 10^5$ лет), атомарный кислород ещё не вошёл в состав других соединений в существенной степени. Однако в моделях с медленным коллапсом его содержание не демонстрирует значительного падения вплоть до финальной стадии коллапса. Пока CO не выморожен, O эффективно восполняется в реакции $\text{CO} + \text{He}^+ \rightarrow \text{C}^+ + \text{O} + \text{He}$. Что касается молекулярного кислорода, до финальной стадии коллапса его содержание постепенно увеличивается — в основном за счёт реакции $\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}$. Затем, когда плотность газа становится достаточно высокой, содержание O_2 быстро падает вследствие сильного вымораживания. Однако к моменту достижения наблюдаемой степени вымораживания CO (см. таблицу 3.1) содержание O_2 в большей части ядра (в пределах $R < 8000$ а.е.) всё ещё превышает 10^{-7} , что не согласуется с наблюдениями для подобных объектов. Эффективный способ уменьшить обилие O_2 в модели — умеренно снизить начальное содержание атомарного кислорода. Однако, если начальное содержание O уменьшится до $< 10^{-4}$, профиль CH_3OH станет обратным (с высоким содержанием к центру ядра и низким к краю) для всех протестированных моделей коллапса.

Уменьшение содержания C и O в начале стадии ядра. Перед запуском моделей дозвёздного ядра мы рассматриваем химическую эволюцию стадии полупрозрачного облака. В конечный момент времени этой стадии содержание свободного углерода составляет 2.7×10^{-6} , а содержание сво-

бодного кислорода — 8.5×10^{-5} . Поскольку формальдегид в основном производится в реакции $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$, снижение содержания атомов С и, особенно, О может подавить его образование. В недавнем моделировании [227], где исследовали химическую эволюцию при формировании молекулярных облаков в слое сжатия за межзвёздными ударными волнами, большая часть С и О оказалась заключена в СО и во льду H_2O соответственно.

Была запущена модель с изменёнными начальными содержаниями для стадии ядра, где весь свободный углерод добавлен к СО, позаимствовав соответствующее количество свободного кислорода, а весь оставшийся свободный кислород добавлен к gH_2O (позаимствовав соответствующее количество атомов водорода у наиболее распространённого компонента H_2). В сравнении с нашей базовой моделью результирующее содержание H_2CO осталось практически неизменным в центральных областях ядра и снизилось лишь втрое на краю ядра. До $\approx 3 \times 10^4$ лет H_2CO появляется в газовой фазе в основном благодаря РД в реакции $\text{gH} + \text{gHCO} \rightarrow \text{gH}_2\text{CO}$, и его содержание в газе растёт высокими темпами, достигая 10^{-8} на момент 10^4 лет. После этого содержание H_2CO начинает падать; однако при 3×10^4 лет доминирующий канал появления H_2CO в газе переключается на реакцию $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$, что снова увеличивает содержание формальдегида до 10^{-8} . Основным источником атомарного кислорода является реакция $\text{He}^+ + \text{CO} \rightarrow \text{C}^+ + \text{O} + \text{He}$, и к моменту 3×10^4 лет его содержание становится равным 3.3×10^{-7} в центральной области ядра. Этого количества достаточно для эффективного образования H_2CO посредством реакции с CH_3 .

Реакции, которые теоретически могут влиять на химию формальдегида. Проблема повышенной концентрации H_2CO в результатах моделирования может быть решена путём его эффективного разрушения. Наиболее эффективна реакция разрушения $\text{H}_2\text{CO} + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{HCO}$ или

$\text{H}_2\text{CO} + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$ при отсутствии барьера активации, как в [228]. Её включение приводит к уменьшению содержания H_2CO втрое и не меняет содержание CH_3OH . Минимальное отношение содержаний $\text{H}_2\text{CO} : \text{CH}_3\text{OH}$ тогда составляет ≈ 2.6 на расстоянии 8000 а.е. от центра ядра — что всё ещё больше единицы. Заметим, что в других работах [229] для этой реакции приводится высокий барьер активации 11–16 кДж/моль, с которым она не может протекать при низких температурах, характерных для молекулярных облаков.

Для реакции $\text{H}_2\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$ в нашей модели указан коэффициент скорости $10^{-11} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$, предложенный в базе данных OSU. В работе [230] коэффициент скорости данной реакции выражается формулой Аррениуса в диапазоне температур 20–550 К (уравнение 7 в упомянутой статье). Экстраполируя это выражение до температуры 10 К, получаем коэффициент скорости, равный $1.26 \times 10^{-11} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$, что близко к нашему значению. Формула Аррениуса, предложенная в работе [231] для 22–300 К (уравнение 11 в данной статье), подразумевает коэффициент скорости $2.57 \times 10^{-10} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$ при 10 К, что на порядок превышает упомянутые ранее значения. Однако ни с одним из этих коэффициентов скорости реакция в нашей модели не влияет на содержание H_2CO .

Для расчёта скорости реакции $\text{H}_2\text{CO} + \text{CN} \rightarrow \text{HCO} + \text{HCN}$ авторы [49] предлагают формулу Аррениуса с константами $\alpha = 10^{-11} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$, $\beta = -0.4$, $\gamma = 0$. Включение этой реакции в нашу модель не влияет на содержание H_2CO . Данная реакция также изучалась при высоких температурах [232], однако экстраполяция этих результатов на условия холодных плотных ядер сомнительна.

Ещё один возможный способ снизить скорость образования формальдегида — эффективно расходовать его прекурсор CH_3 в других реакциях помимо образования H_2CO . Мы протестировали реакции $\text{CH}_3 + \text{N} \rightarrow \text{CH}_2\text{N} + \text{H}$ [233, 234], $\text{CH}_3 + \text{HCO} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{CO}$ [196] и $\text{CH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$

[235], однако их включение в модель не повлияло на содержание H_2CO .

Варьирование скорости реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$. Чтобы получить коэффициент скорости реакции $\text{CH}_3 + \text{O}$ для широкого диапазона температур 50–2000 K, авторы [197] выполнили многостадийные квантовые расчёты реактивного рассеяния (multistate quantum reactive scattering calculations), а также классические расчёты захвата (classical capture calculations) (см. рисунок 7 в их работе) и вывели положительную температурную зависимость для данной реакции. Минимальная рассчитанная ими скорость составляет $0.6 \times 10^{-10} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$ при минимальной температуре 50 K. Использование этого значения в нашей базовой модели приводит к уменьшению содержания H_2CO в центре ядра лишь в 1.1 раза.

Варьирование начальной плотности и температуры. Мы проварьировали начальные физические условия для диффузного/полупрозрачного облака следующим образом:

- начальная температура составляет 20 K и линейно уменьшается до 10 K, плотность газа составляет 10^3 см^{-3} ;
- начальная температура составляет 20 K и линейно уменьшается до 10 K, плотность газа составляет 10^2 см^{-3} ;
- температура равна 20 K и не изменяется, плотность газа составляет 10^3 см^{-3} ;
- температура равна 20 K и не изменяется, плотность газа составляет 10^2 см^{-3} .

Во всех этих случаях содержание H_2CO либо остаётся таким же, как в базовой модели, либо даже несколько увеличивается.