

На правах рукописи

ВАСЮНИН Антон Иванович

УДК 524.5

РАЗВИТИЕ ТЕОРИИ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
МОЛЕКУЛЯРНОГО СОСТАВА МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЫ

Специальность 01.03.02 — астрофизика и радиоастрономия

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва
2008

Работа выполнена в Уральском Государственном университете имени А.М. Горького.

Научный руководитель:
кандидат физ.-мат. наук Андрей Михайлович Соболев

Официальные оппоненты:
доктор физ.-мат. наук Николай Геннадьевич Бочкарёв
кандидат физ.-мат. наук Сергей Владимирович Каленский

Ведущая организация: Институт прикладной физики РАН
(ИПФ РАН)

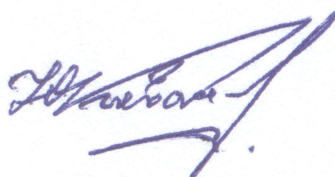
Защита состоится “2” марта 2009 г. в 15 часов на заседании
Диссертационного совета Д002.023.01 Физического института
им. П.Н. Лебедева РАН по адресу: 119991, Москва,
Ленинский проспект, д. 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке
Физического института им. П.Н. Лебедева РАН.

Автореферат разослан “30” января 2009 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

д.ф.-м.н.



Ю. А. Ковалев

Актуальность темы

Химические процессы в межзвездной среде являются объектом пристального внимания астрофизиков уже более тридцати лет. Неослабевающий интерес к ним обусловлен, в частности, тем, что многие важнейшие процессы звездообразования и формирования планетных систем доступны для исследования только посредством наблюдений радиолиний молекул, так как зоны звездообразования, как правило, непрозрачны для оптического излучения из-за большого количества пыли в них. Даже сейчас, когда благодаря космическим методам астрономам стали доступны для наблюдений все длины волн, радиоастрономические наблюдения не потеряли своей актуальности.

Поскольку водород и гелий, на долю которых приходится около 99 % массы комплексов звездообразования, не имеют вращательных переходов, их наблюдения в радиодиапазоне невозможны. В этой ситуации информация о процессах, протекающих в областях звездообразования получается из наблюдений менее обильных молекул, которых к настоящему времени открыто порядка 140. Интерпретация наблюдений требует построения моделей химической эволюции межзвездной среды (МЗС), включающих такие процессы, как химию в газовой фазе, процессы газопылевого взаимодействия и химические реакции на поверхности пылевых частиц. Последние могут играть определяющую роль в химии ряда наблюдаемых молекул, таких, как CO, NH₃, H₂CO.

Развитие техники наблюдений, качественное повышение чувствительности, спектрального и углового разрешения, ожидающееся в ближайшее десятилетие благодаря вводу в строй инструментов нового поколения, таких, как ALMA, Herschel, eVLA, SOFIA, в ближайшем будущем потребуют построения нового поколения астрохимических моделей. Наряду с реалистичным детальным описанием физики МЗС, важное значение будет иметь математически корректное описание собственно химических процессов, как известно,

имеющих стохастическую природу [1]. Кроме этого, при интерпретации результатов высокоточных наблюдений, становится важной оценка точности результатов химического моделирования, неопределенности в которые, в частности, вносят такие сугубо химические факторы, как ошибки определения констант скоростей химических реакций.

Таким образом, требования к улучшению качества астрохимических моделей диктуются возрастающими возможностями инструментария наблюдателей, появлением возможности детального изучения не только протозвездных облаков, но также имеющих малый угловой размер протопланетных дисков. Оценка точности астрохимического моделирования, а также введение в астрохимические модели корректного описания стохастической природы химических процессов — первые шаги на пути создания моделей нового поколения.

Цель работы

Улучшение качества астрохимических моделей путем разработки и внедрения в модели корректного стохастического описания химических процессов на поверхности межзвездных пылевых частиц, а также исследование и оценка возможностей уменьшения неточностей результатов моделирования, обусловленных погрешностями в скоростях химических реакций.

Основные результаты, выносимые на защиту

1. Оценка влияния неточностей констант скоростей химических реакций на результаты астрохимического моделирования темных и диффузных облаков, а также протопланетных дисков.

Впервые выполнено исследование влияния неопределенностей констант скоростей химических реакций на достоверность газофазных моделей химической

эволюции различных астрофизических объектов — темного и диффузного облаков, а также протопланетного диска вокруг маломассивной звезды типа Т Тельца. Выявлена зависимость неопределенности модельного обилия молекулы от числа атомов в ней: она тем значительнее, чем больше атомов в молекуле. Показано, что моделирование химических процессов в молекулярных облаках с использованием баз UMIST 95 и RATE06 не приводит к величинам неопределенности в теоретических обилиях простых молекул, превышающим наблюдательные ошибки. Обнаружено, что лучевые концентрации некоторых молекул в диске менее подвержены влиянию ошибок скоростей химических реакций (CO , C^+ , N_3^+ , H_2O , NH_3 , N_2H^+ , HCNH^+), что делает их вероятными кандидатами на роль индикаторов физических условий в протопланетных дисках.

2. Отождествление группы химических реакций, вносящих наибольший вклад в неточности модельных обилий химических соединений.

Предложен корреляционный метод поиска химических реакций, значение скорости которых наиболее сильно влияет на модельное обилие заданного соединения. С помощью предложенного метода выделена небольшая группа реакций (56 или 1 % от общего числа включенных в модель), вносящая наибольший вклад в неопределенности модельных обилий молекул в облаках и диске. Данные реакции предлагаются для дальнейшего лабораторного изучения.

3. Развитие стохастической модели химической эволюции газопылевой химически реагирующей системы, применимая к моделированию широкого спектра астрофизических объектов.

Впервые построена стохастическая модель химической эволюции межзвездной среды, в которой химические процессы в газовой фазе и на поверхности пылевых

частиц моделируются в рамках единого метода Монте Карло. Использованный метод позволил включить в стохастическую химическую модель большое количество молекул (600) и реакций между ними (более 6000). Благодаря этому стало возможным исследование границ применимости методов балансных уравнений и модифицированных балансных уравнений для моделирования различных астрофизических объектов.

Научная новизна

В диссертации впервые исследовано влияние неопределенностей констант скоростей химических реакций на результаты астрохимического моделирования протозвездных облаков и протопланетных дисков. Выявлена зависимость величины дисперсии модельных обилий молекул от количества входящих в них атомов. Показано, что для большинства наблюдаемых молекул величина ошибки модельных обилий соответствует точности наблюдательных данных. Для протопланетных дисков выделен ряд соединений, чьи модельные обилия в меньшей степени подвержены влиянию неопределенностей в скоростях реакций, что делает их хорошими кандидатами на роль зондов физических условий в дисках.

Показано, что основной вклад в неопределенности модельных обилий молекул вносит небольшая группа химических реакций (менее 1 % от общего количества включенных в модель).

Впервые построена стохастическая модель химической эволюции межзвездной среды, в которой химические процессы в газовой фазе и на поверхности пылевых частиц моделируются в рамках единого метода Монте Карло. Использованный подход впервые позволил включить в стохастическую химическую модель большое количество молекул (600) и реакций между ними (более 6000). Благодаря этому стало возможным исследование границ применимости

методов балансных уравнений и модифицированных балансных уравнений для моделирования различных астрофизических объектов, также впервые выполненное в этой работе.

Научная и практическая ценность

Оценки неточностей модельных обилий химических соединений, полученные в этой работе, могут найти широкое применение при сравнении данных, полученных при наблюдениях линий молекул, с результатами теоретических исследований. Группа химических реакций, вносящих наибольший вклад в неточности модельных обилий молекул, может быть рекомендована для особенно внимательного изучения исследователями, выполняющими лабораторные измерения скоростей химических процессов.

Стохастическая модель химической эволюции межзвездной среды необходима для исследований межзвездных облаков и протопланетных дисков, а также интерпретации наблюдательных данных по химическому составу вещества этих объектов. Помимо этого, с помощью построенной модели возможно проведение исследований стохастических эффектов в астрохимических системах, примером которых является бистабильность. Описание химических процессов на поверхности пылевых частиц в рамках модели может быть детализировано, что позволит использовать ее при подробном изучении структуры и состава мантий межзвездных и межпланетных пылевых частиц.

Личный вклад автора в совместные работы

В работах, выполненных в соавторстве, автор диссертации:

1. предложил и реализовал проведение оценок влияния неточностей скоростей химических реакций на результаты астрохимического моделирования;

2. разработал стохастическую модель химической эволюции межзвездной среды;
3. реализовал программный код, впервые позволяющий проводить самосогласованный расчет как газофазной, так и поверхностной химии методом Монте Карло с использованием сетки газофазных и поверхностных реакций, содержащих описания реалистично большого числа химических соединений и процессов между ними;
4. провел исследование границ применимости методов Балансных уравнений и Модифицированных балансных уравнений для моделирования химической эволюции межзвездной среды;
5. выполнил все численные расчеты химических процессов в межзвездной среде с использованием как детерминистических, так и стохастических методов;
6. принимал активное участие в постановке задач, обсуждении и интерпретации результатов и написании статей.

Апробация

Результаты работы были представлены на всероссийских и международных конференциях, а также семинарах кафедры астрономии и геодезии Уральского Государственного университета им. А.М. Горького и Института астрономии общества Макса Планка (Хайдельберг, Германия):

1. на XXXII, XXXIV, XXXV и XXXVII Зимних студенческих конференциях «Физика Космоса», проходивших в Астрономической обсерватории УрГУ в 2004, 2005, 2006 и 2008 гг.;
2. на 11 и 12 Всероссийских конференциях студентов—физиков, проходивших в Екатеринбурге (2005) и Новосибирске (2006);

3. на 4 международном симпозиуме The Dense Interstellar Medium in Galaxies (4th Cologne-Bonn-Zermatt-Symposium), проходившем в г. Церматт (Швейцария, 2003);
4. на совещании «Звездообразование в Галактике и за ее пределами», проходившем в Институте астрономии РАН (Москва) в 2006 году;
5. на международном симпозиуме «Complex molecules in Space: Present status and prospects with ALMA», проходившем в г. Fuglsocentret (Дания) в 2006 году;
6. на международной конференции «Science with ALMA: a new era for Astrophysics», проходившей в Мадриде (Испания) в 2006 г.;
7. на международной конференции «Molecules in Space and Laboratory», проходившей в Париже (Франция) в 2007 году;
8. на семинарах Института астрономии общества Макса Планка в г. Гейдельберге (Германия) в 2006 и 2008 годах.

Структура работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Содержит 9 таблиц на 9 страницах, 24 рисунка на 24 страницах, библиографию из 160 наименований на 18 страницах. Общий объем – 161 страница.

Публикации

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. *Васюнин А. И., Соболев А. М., Вибе Д. З., Семенов Д. А.* О влиянии неточностей скоростей химических реакций на результаты астрохимического моделирования // Письма в Астрон. журн. — 2004. — Т. 30, № 8. — С. 623–634.

2. *Vasyunin A. I., Semenov D. A., Henning T., Wakelam V., Herbst E., Sobolev A. M.* Chemistry in disks: a sensitivity analysis // *Astrophys. J.* — 2008. — Vol. 672. — P. 629–641.
3. *Васюнин А. И.* Моделирование химии на поверхности пылевых частиц: нужен ли учет стохастических эффектов? // *Физика космоса. — Труды 37-й междуна­род. студ. науч. конф., Екатеринбург, 28 янв.–1 февр. 2008 г.* — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2008. — С. 254. Эта публикация содержит основные результаты. Более подробное изложение содержится в статье *Vasyunin A. I., Semenov D. A., Wiebe D. S., Henning Th.* «A Unified Monte Carlo Treatment of Gas-Grain Chemistry for Large Reaction Networks. I. Testing Validity of Rate Equations in Molecular Clouds» принятой к печати в *Astrophysical Journal* (13 стр., astro-ph/0810.1591).
4. *Vasyunin A. I., Semenov D. A., Henning T., Wakelam V., Herbst E., Sobolev A. M.* Chemistry in protoplanetary disks: analysis of uncertainties // *Molecules in Space and Laboratory. — Proc. meet., Paris, France, May 14-18, 2007.* Editors: J.L. Lemaire, F. Combes. — 2007. — Publisher: S. Diana. — P. 112.
5. *Vasyunin A. I., Semenov D. A., Sobolev A. M., Henning T.* Reliability of disk chemical modelling // *Science with ALMA: a new era for astrophysics. — Proc. Internat. conf., Madrid, Spain, Nov. 13–17, 2006.* — P. 88.
6. *Vasyunin A. I., Semenov D. A., Sobolev A. M., Henning T.* Reliability of disk chemical modelling // *Complex molecules in Space: Present status and prospects with ALMA. — Proc. symp., Fuglsocentret, Denmark, May 8–11, 2006.* — P. 68.
7. *Васюнин А. И.* Стохастическое моделирование химической эволюции МЗС с учетом газопылевого взаимодействия // *Звездообразование в Галактике и за ее пределами / Ред. Д. З. Вибе, М. С. Кирсанова. — Сб. трудов конф., Москва, 17–18 апр. 2006 г.* — М.: Янус–К, 2006. — С. 119–125.

8. *Васюнин А. И., Соболев А. М.* Стохастическое моделирование химической эволюции МЗС с учетом газопылевого взаимодействия // Физика космоса. — Труды 35-й междунаро­д. студ. науч. конф., Екатеринбург, 31 янв.–5 февр. 2006 г. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2006. — С. 242.
9. *Васюнин А. И., Шематович В. И.* Стохастические методы моделирования химии межзвездной среды // Физика космоса. — Труды 34-й междунаро­д. студ. науч. конф., Екатеринбург, 31 янв.–4 февр. 2005 г. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2005. — С. 246.
10. *Васюнин А. И., Семенов Д. А., Соболев А. М., Henning T.* О точности астрохимического моделирования околозвездных дисков // Физика космоса. — Труды 34-й междунаро­д. студ. науч. конф., Екатеринбург, 31 янв.–4 февр. 2005 г. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2005. — С. 247.
11. *Васюнин А. И., Соболев А. М., Вибе Д. З., Семенов Д. А.* О влиянии неточностей скоростей химических реакций на результаты астрохимического моделирования // Физика космоса. — Труды 33-й междунаро­д. студ. науч. конф., Екатеринбург, 2–6 февр. 2004 г. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2004. — С. 239.
12. *Sobolev A. M., Vasyunin A. I.* Quantification of uncertainties in the model interstellar chemical abundances arising from inaccuracies in reaction rates // The dense interstellar medium in galaxies. Abstract book. — 4th Cologne-Bonn-Zermatt-Symp., Zermatt, Switzerland, Sept. 22–26, 2003. — P. 282.

Краткое содержание диссертации

Во введении обосновывается актуальность и формируются основные цели исследований, проведенных в диссертации.

Глава I диссертации содержит обзор современных представлений об образовании звезд малой массы и роли

химических процессов в межзвездной среде (МЗС) в ходе этого процесса и его исследовании. Согласно [2], процесс образования звезд малых масс и планетных систем вокруг них может быть разделен на 5 основных этапов. На первом этапе происходит фрагментация гигантского молекулярного облака и появление в нем плотных холодных ядер, индикаторами которых выступают такие молекулы, как C_2S и NH_3 . На втором этапе начинается коллапс плотных ядер. Химической особенностью этой стадии является высокая степень вымерзания большинства молекул (H_2O , CO , CO_2) из газовой фазы на пыль в центральной, наиболее плотной, темной и холодной части ядра. Третий этап коллапса характеризуется появлением в центре горячей протозвезды, начинающей разгонять своим излучением окружающее вещество, в которое она пока еще глубоко погружена. Поскольку на этой стадии продолжается аккреция вещества из облака на звезду, наличие у вещества углового момента обуславливает возникновение вокруг звезды аккреционного диска и биполярных джетов. Индикаторами взаимодействия джетов с окружающим веществом выступают молекулы CH_3OH , SO , SO_2 , HCN , SiO , диска — H_2O . На четвертом этапе практически сформировавшаяся звезда уже разогнала окружающую ее материю облака и окружена лишь протопланетным диском, в котором формируются такие молекулы, как CN , HNC , HCO^+ , H_2O , CO , HCN . Наконец, пятый и последний этап характеризуется появлением молодой звезды главной последовательности и, возможно, планетной системы вокруг нее.

Кроме того, в главе I отмечаются особенности химического состава протопланетных дисков: пониженное в 3 — 100 раз по сравнению с протозвездным облаком содержание ряда молекул, наличие излучения молекул CO и HCO^+ , возникающего в холодном ($\sim 10K$) газе, в некоторых из них. В главе I отмечается, что химические процессы в межзвездной среде определяют такие ключевые физические параметры звездообразования, как степень ионизации среды, а также

процессы охлаждения газа. Следовательно, детальное изучение химических процессов в межзвездной среде важно не только с наблюдательной точки зрения, но и для понимания сущностей физических процессов, сопровождающих образование звезд [3].

Далее в главе I рассматриваются основные типы химических процессов в межзвездной среде и особенности современных астрохимических моделей. Химические процессы в МЗС могут быть разделены на 2 основных типа. Процессы первого типа протекают в газе, в то время, как процессы второго типа — на поверхности пылевых частиц. Основными типами химических реакций, протекающих в газовой фазе, являются реакции радиативной ассоциации, на начальных этапах химической эволюции приводящие к образованию более сложных молекул из простых, процессы фотоионизации и фотодиссоциации, приводящие к образованию молекулярных ионов и разрушению сложных молекул, а также ион–нейтральные и нейтрально–нейтральные реакции, приводящие к перераспределению связей между атомами реагентов, и, следовательно, к превращению одних сложных молекул в другие.

Химическое взаимодействие газа и пылевых частиц осуществляется через процессы аккреции и десорбции атомов и молекул. В частности, именно процесс аккреции ответственен за вымерзание молекул из газа на пыль в темных холодных молекулярных ядрах.

Химические реакции на поверхности пылевых частиц — своего рода каталитические процессы, в которых естественным природным катализатором выступает поверхность пылевой частицы. Важнейшим из них является фундаментальный процесс образования молекулярного водорода. Другие поверхностные реакции в основном приводят к образованию сложных молекул из более простых. Особенно эффективно на поверхности пылевых частиц формируются сложные органические молекулы, содержащие длинные углеродные цепочки [4]. В главе I отмечается, что при моделировании

химических реакций на поверхности пылевых частиц важен учет их стохастической природы [5].

Современные астрохимические модели, как правило, строятся в приближении так называемых химических балансных уравнений (ХБУ) и включают до нескольких сотен атомов и молекул и нескольких тысяч химических реакций между ними. Источниками данных о химических реакциях и их скоростях является несколько публично доступных баз данных, например, OSU.2007 [6] и RATE06 [7]. Константы скорости этих химических реакций зачастую определены с невысокой точностью и могут содержать ошибки от 50 % до порядка величины.

Глава II диссертационной работы посвящена исследованию влияния неточностей констант скоростей реакций на результаты астрохимического моделирования. В главе исследуются случаи темного ($n(\text{H})=2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-3}$, $T=10\text{K}$, $A_V > 10$) и диффузного ($n(\text{H})=5 \cdot 10^3 \text{ см}^{-3}$, $T=30\text{K}$, $A_V=0.5$) облаков.

Для всех рассмотренных случаев исследование выполнено с использованием статистической методики. Методика анализа заключалась в создании и последующем статистическом анализе большой выборки (порядка 10000) статических газофазных моделей химической эволюции, рассчитанных при одинаковых физических условиях, с одинаковым набором химических реакций между одними и теми же соединениями, но с различными константами скоростей. Для определенности мы ограничились рассмотрением влияния погрешности в определении α , константы в коэффициенте скорости реакции, варьирование которой приводит к его линейному изменению и не изменяет такие свойства реакции, как температурный барьер и др. Величина α выбиралась случайным образом внутри соответствующего интервала ошибок, центрированного на значении константы, приведенном в базе химических реакций.

Для модельных обилий молекул были рассчитаны дисперсии, на основании величин которых для случаев темного и диффузного облаков молекулы были разделены на 6 групп.

Была выявлена зависимость величины дисперсии модельного обилия молекул от их сложности, т.е. от числа составляющих их атомов. По-видимому, это связано с тем, что неточности модельных обилий, обусловленные неопределенностями скоростей химических реакций, имеют кумулятивный характер и накапливаются в длинных цепочках реакций. Поскольку сложная молекула образуется, как правило, в более длинной цепочке последовательных процессов, результирующая дисперсия ее обилия оказывается больше. При этом в главе II отмечается, что дисперсии обилий наблюдаемо значимых молекул не превышают 0.5 — 1 порядка величины, что сопоставимо с точностью их определения из наблюдений.

Далее в главе II исследуется влияние неточностей скоростей реакций на определение физических параметров молекулярных облаков. В частности, показывается, что “химические часы”, основанные на отношении обилий цианополиинов (например, $\text{HC}_3\text{N}/\text{HC}_5\text{N}$) практически перестают работать, если учесть в химической модели неточности скоростей химических реакций.

После этого в главе II исследуется вопрос о том, какие химические реакции вносят наибольший вклад в неточности модельных обилий, и могут ли эти неточности быть уменьшены. Используемый в работе метод варьирования констант скоростей позволяет оценить линейную корреляцию обилия данной молекулы с константами скоростей отдельных реакций. Показано, что реакции, имеющие наибольшие значения коэффициентов корреляции между выборками их констант α и обилиями данной молекулы, вносят наибольший вклад в результирующую неопределенность модельного обилия данной молекулы. Для случая темного облака выделены химические реакции, вносящие наибольший вклад в неточности модельных обилий цианополиинов HC_nN , $n=1 - 9$.

В главе III проведено исследование влияния неточностей скоростей химических реакций на результаты моделирования протопланетного диска ($R = 800 \text{ a.e.}$, $M_{disk} = 0.07 M_{\odot}$, скорость

аккреции $\dot{M} = 10^{-8} M_{\odot}/\text{год}$, параметр вязкости $\alpha = 0.01$ [8]) вокруг звезды типа Т Тельца. Помимо изучения аспектов, аналогичных рассмотренным в первой части главы, для протопланетного диска выполнены дополнительные действия: построены карты распределения обилий ионов и молекул в диске, а также карты распределения их дисперсий. Обнаружено, что лучевые концентрации некоторых молекул в диске менее подвержены влиянию ошибок скоростей химических реакций (CO , C^+ , N_3^+ , H_2O , NH_3 , N_2H^+ , HCNH^+), что делает их вероятными кандидатами на роль индикаторов физических условий в протопланетных дисках. С помощью корреляционного метода выделена небольшая группа реакций (56 или 1 % от общего числа включенных в модель), вносящая наибольший вклад в неопределенности модельных обилий молекул в облаках и диске. Данные реакции предлагаются для дальнейшего лабораторного изучения.

В главе IV диссертации строится стохастическая модель химической эволюции межзвездной среды, исследуются границы применимости методов балансных уравнений и модифицированных балансных уравнений для моделирования химических процессов на поверхности пылевых частиц, а также описывается неизвестный ранее высокоэффективный способ формирования молекулярного водорода на поверхности пылевых частиц.

В начале главы IV подробно изложены основы математического аппарата, на который опирается стохастическое описание химически реагирующих систем. Формулируется химическое управляющее уравнение, строится иерархия стохастических моделей. Показывается, что детерминистические химические балансные уравнения являются предельным случаем стохастического химического управляющего уравнения при бесконечно большом числе реагирующих частиц. На основе введенного математического аппарата строится классический алгоритм стохастического моделирования (АСМ) [1].

Микрофизическая модель химических процессов на поверхности пылевой частицы построена на основе работы [4]. Поскольку ряд аспектов химии на поверхности пылевых частиц слабо изучен, в диссертации рассмотрено два варианта модели. В первом основным источником мобильности легких атомов и молекул является эффект квантового туннелирования через потенциальные барьеры на поверхности пылевой частицы, а отношения энергий десорбции к энергиям диффузии E_b/E_D атомов и молекул равно 0.3 [4]. Во втором случае источником мобильности всех атомов и молекул являются лишь их тепловые колебания, а отношение E_b/E_D принято равным 0.77 [9]. В главе IV отмечено, что большее влияние стохастичности поверхностной химии на результаты моделирования ожидается в первом случае, т.к. химические балансные уравнения некорректны прежде всего при описании случая так называемого “аккреционного предела”, т.е. ситуации, в которой скорости поверхностных реакций выше скоростей аккреции реагентов из газа на пыль. Эта ситуация тем вероятнее, чем выше скорости поверхностных реакций. Наибольшие их значения достигаются при учете эффекта квантового туннелирования и при использовании значения $E_b/E_D = 0.3$.

Описанная выше микрофизическая модель является частью построенной автором диссертации стохастической модели химической эволюции МЗС. Впервые в рамках единого метода Монте Карло удалось совместить расчет как газофазной, так и поверхностной химии. При этом также впервые модель включает достаточное для реалистичного описания сложных химических процессов в МЗС число атомов и молекул и химических реакций: более 600 и 6000 соответственно. В главе IV также описан программный код, написанный автором для расчета этой и аналогичных моделей.

При помощи построенной стохастической модели путем сравнения результатов было выполнено исследование границ применимости детерминистических метода химических балансных уравнений и модифицированных балансных уравнений для моделирования химической эволюции МЗС

с учетом химии на поверхности пылевых частиц. Сравнение проводилось для диапазона физических условий ($A_v=0.2 - 15$, $n(H)=10^2 \text{ см}^{-3} - 10^4 \text{ см}^{-3}$, $T=10\text{К} - 50\text{К}$), включающего сочетания условий, типичные для диффузных облаков ($A_v \sim 2$, $n(H) = 10^3 \text{ см}^{-3}$, $T = 30\text{К}$) и плотных молекулярных ядер ($A_v \sim 10$, $n(H) = 10^4 \text{ см}^{-3}$, $T = 10\text{К}$). Было установлено, что удовлетворительное согласие между методами балансных уравнений и Монте Карло достигается только в случае, если рассматриваемая микрофизическая модель поверхностной химии подразумевает невысокую мобильность реагентов на поверхности пылевой частицы. В нашей работе это модель без учета эффекта квантового туннелирования и с отношением энергий диффузии к энергиям десорбции $E_b/E_D=0.77$. В моделях с иными параметрами микрофизики (с учетом эффекта квантового туннелирования или с $E_b/E_D=0.3$) для большинства физических условий наибольшие различия наблюдаются в модельных обилиях молекул на поверхности пылевых частиц. При этом, при температуре $T \sim 30\text{К}$ имеется особая зона, где наблюдаются различия не только обилий на поверхности пыли, но и в обилиях наблюдаемых газофазных молекул (CO , NH_3). Показано, что это связано с неправильной оценкой скорости конвертации молекулы CO в CO_2 на пылевых частицах при расчете методами балансных уравнений. Отмечено, что согласие метода Монте Карло с методом модифицированных балансных уравнений в целом несколько лучше, нежели с методом стандартных балансных уравнений.

В Заключение приводятся основные результаты и выводы диссертации, показана научная новизна основных результатов диссертации и их научная и практическая ценность.

Список литературы

- [1] *Gillespie D. T.* A General Method for Numerically Simulating the Stochastic Time Evolution of Coupled Chemical Reactions // *Journal of Computational Physics.* — 1976. — Vol. 22. — P. 403.
- [2] *van Dishoeck E. F., Blake G. A.* Chemical Evolution of Star-Forming Regions // *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* — 1998. — Vol. 36. — P. 317–368.
- [3] *Langer W. D., van Dishoeck E. F., Bergin E. A. et al.* Chemical Evolution of Protostellar Matter // *Protostars and Planets IV.* — 2000. — P. 29.
- [4] *Hasegawa T. I., Herbst E., Leung C. M.* Models of gas-grain chemistry in dense interstellar clouds with complex organic molecules // *Astrophys. J., Suppl. Ser.* — 1992. — Vol. 82. — P. 167–195.
- [5] *Tielens A. G. G. M., Hagen W.* Model calculations of the molecular composition of interstellar grain mantles // *Astron. Astrophys.* — 1982. — Vol. 114. — P. 245–260.
- [6] *Smith I. W. M., Herbst E., Chang Q.* Rapid neutral-neutral reactions at low temperatures: a new network and first results for TMC-1 // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* — 2004. — Vol. 350. — P. 323–330.
- [7] *Woodall J., Agúndez M., Markwick-Kemper A. J., Millar T. J.* The UMIST database for astrochemistry 2006 // *Astron. Astrophys.* — 2007. — Vol. 466. — P. 1197–1204.
- [8] *Dutrey A., Guilloteau S., Guelin M.* Chemistry of protosolar-like nebulae: The molecular content of the DM Tau and GG Tau disks. // *Astron. Astrophys.* — 1997. — Vol. 317. — P. L55–L58.
- [9] *Katz N., Furman I., Biham O. et al.* Molecular Hydrogen Formation on Astrophysically Relevant Surfaces // *Astrophys. J.* — 1999. — Vol. 522. — P. 305–312.

Подписано в печать 08.12.2008. Формат 60x84/16
Бумага офсетная. Усл. печ. л. 1,2
Тираж 100 экз. Заказ N
Отпечатано в ИПЦ «Издательство УрГУ»
620083, г. Екатеринбург, ул. Тургенева, 4