

15 марта 2017 г.

Молекулы и звезды

Б.М.Шустов

Институт астрономии РАН



Молекулы на Земле и в космосе

Молекулы: заглянем в Википедию

Молекула (уменьшительное от лат. *moles* — масса) — электрически нейтральная частица, образованная из двух или более связанных ковалентными связями атомов. (В физике к молекулам иногда причисляют также одноатомные молекулы, но это устарело). Обычно подразумевается, что молекулы нейтральны (не несут электрических зарядов) и все валентности насыщены. Заряженные молекулы называют ионами, молекулы с ненасыщенными валентностями — радикалами.

Первое экспериментальное доказательство существования молекул, дано Жаном Перреном в 1906 году, изучавшем броуновское движение. Жан Перрен - лауреат Нобелевской премии по физике 1926 года «за работу по дискретной природе материи».



С точки зрения квантовой механики молекула представляет собой систему не из атомов, а из электронов и атомных ядер, взаимодействующих между собой.

Состав и строение молекулы воды

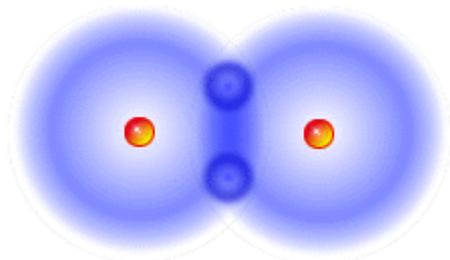
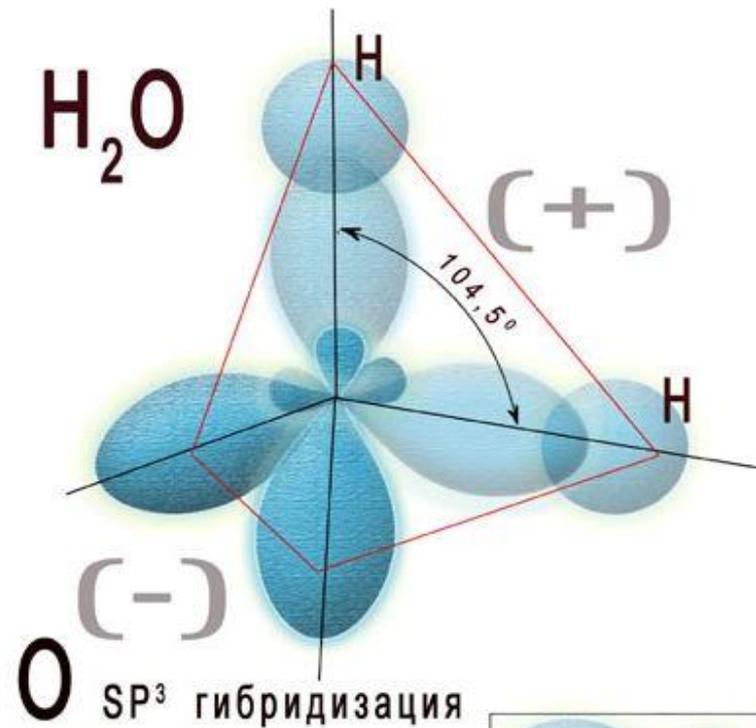
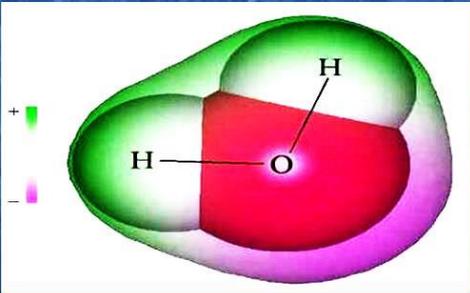
Молекула воды состоит из 2 атомов водорода и 1 атома кислорода, которые находятся друг относительно друга под углом 105° .

Внутри молекулы – ковалентная полярная связь.

H_2O

$M_r = 18$ г/моль

Диполь – полярная молекула.



N_2 - неполярная молекула

Современная алхимия

Как изучают, прогнозируют и конструируют строение и свойства веществ



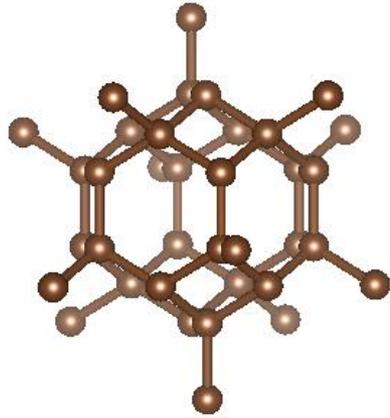
А.Кабанов

Самарский государственный университет, Межвузовский научно-исследовательский центр теоретического материаловедения (МНИЦТМ)
<http://sctms.ru/>,

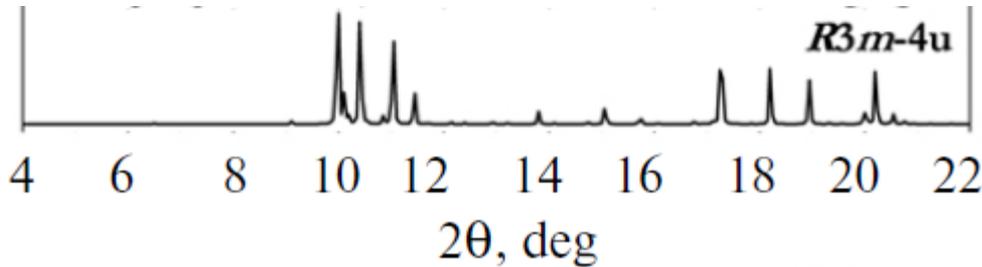
Один из мощных инструментов современного «алхимика» - теория функционала плотности (**ТФП**, в английской версии - **DFT**) - метод расчёта электронной структуры систем многих частиц в квантовой физике и химии. (*Hohenberg, Kohn* Нобелевская премия по химии 1998г)

Какая информация нужна о веществе, чтобы провести расчеты его свойств методами ТФП?

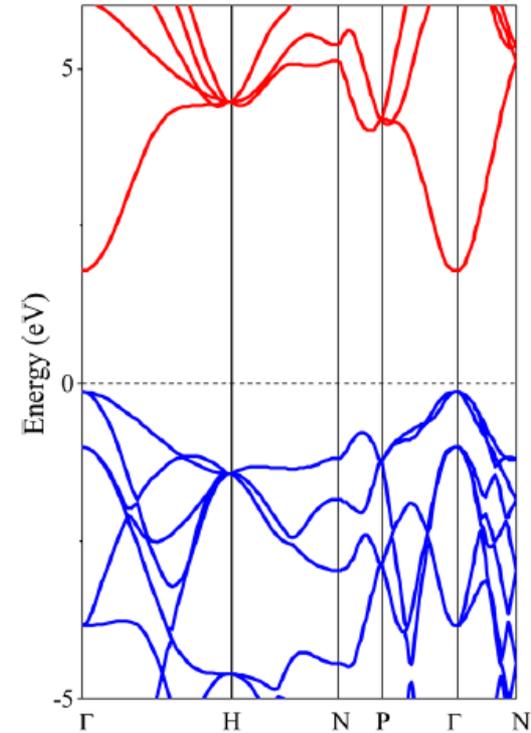
Химический состав, структура атомной решетки.



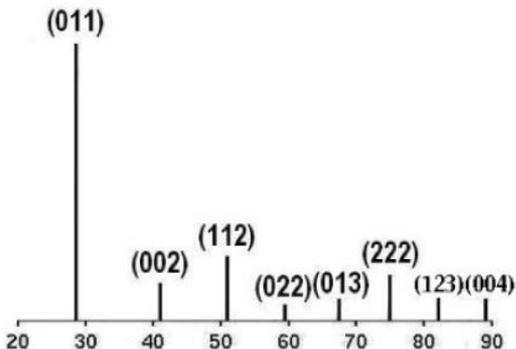
Зная структуру вещества (из эксперимента, или используя конструктор молекул) можно вычислить многие свойства:



X-ray diffraction patterns, XRD



Структура электронных уровней



electron diffraction patterns

Используя методы ТФП можно моделировать свойства не только известных тел (в том числе молекул), но и предсказывать возможность существования новых тел и их свойства. Пример из астрофизики: база данных ИК-спектров частиц ПАУ, рассчитанных методом ТФП <http://www.astrochemistry.org/pahdb/theoretical/2.00/default>



[Browse](#) [Selection](#) [Download](#) [Tools](#) [Results](#) — [Help](#)

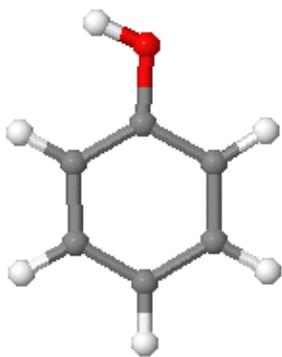


(e.g., $C \leq 20$ $N=2$ neutral)

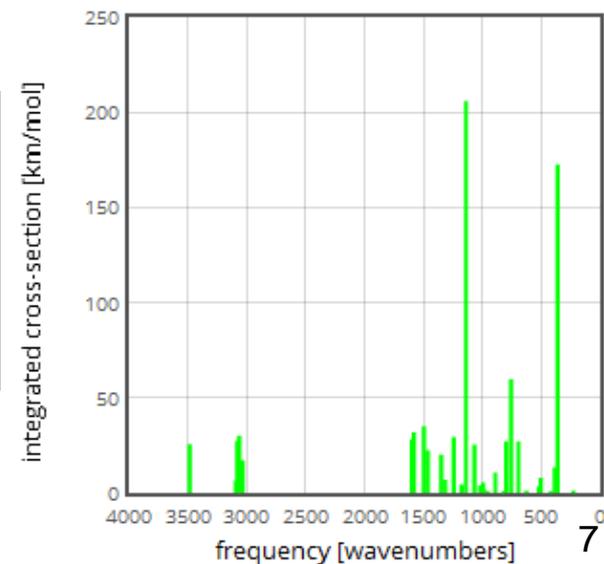
[Advanced](#)

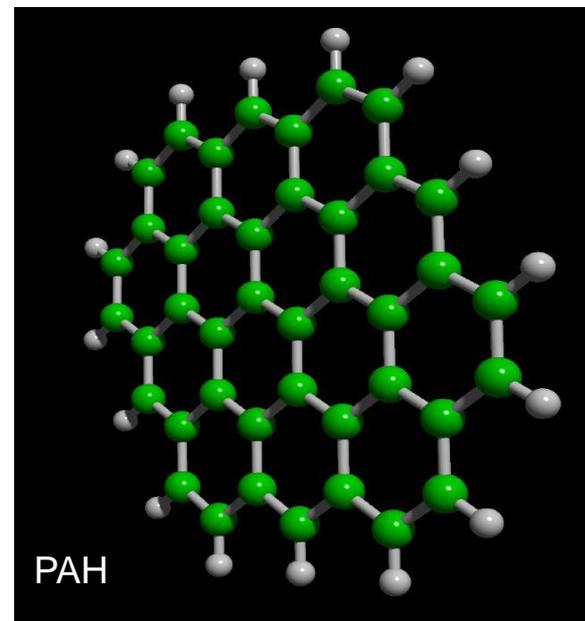
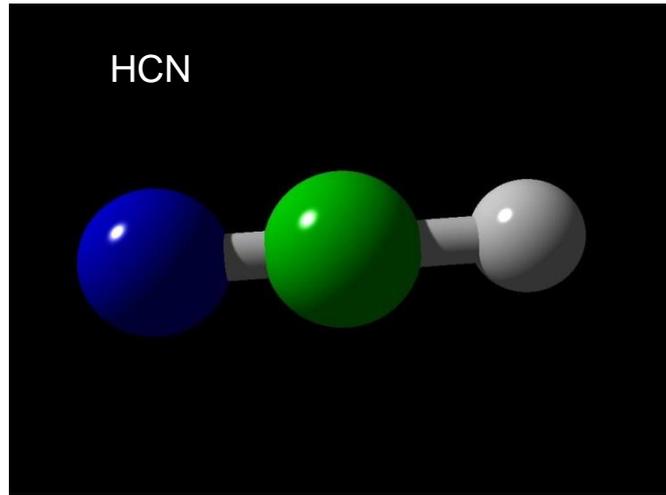
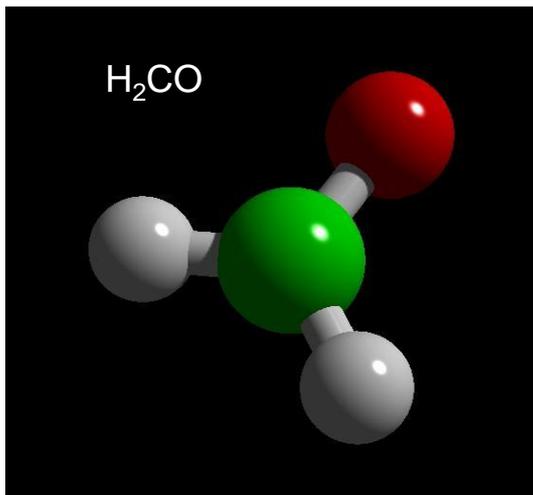
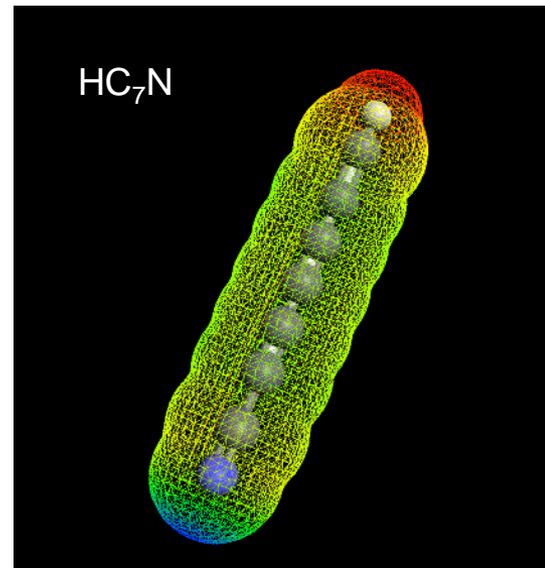
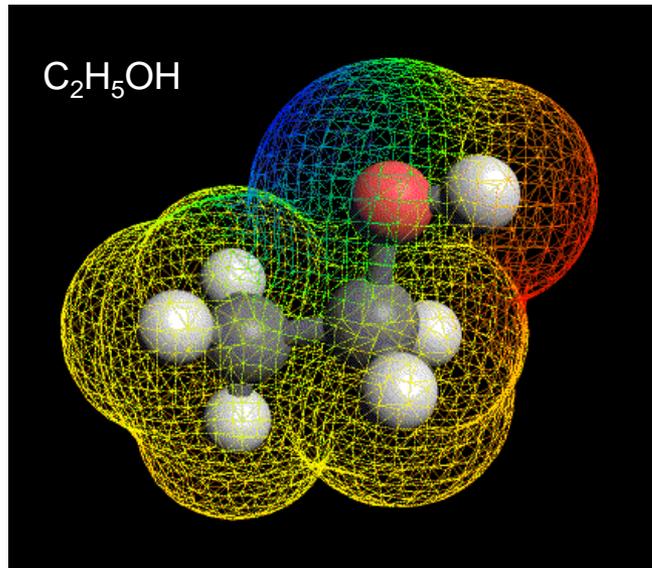
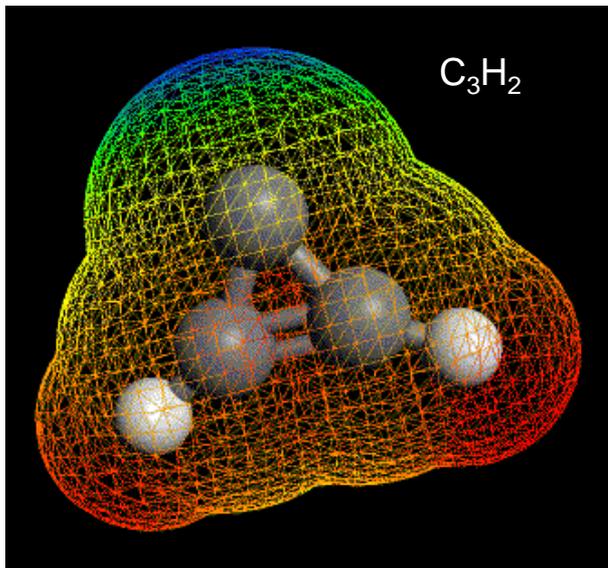
Theory | [Experiment](#) — [Versions](#)

[C₆H₆O](#)



uid	428
id	19945
symmetry	C _s
scaling factor	0.958





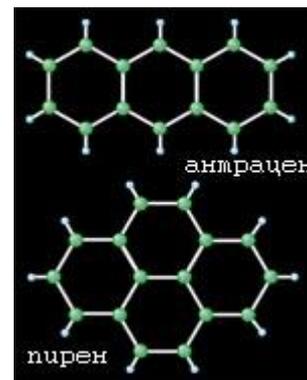
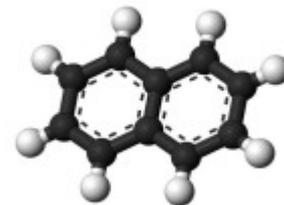
Полициклические ароматические углеводороды

ПАУ (англ. PAH)

ПАУ – органические вещества, содержащие несколько углеродных колец. Такие соединения представляют собой распространенные органические загрязнители, содержащиеся в автомобильном выхлопе, нефти, сигаретном дыме. Некоторые из них канцерогенны.

Но и у них имеются свои достоинства: сходные структуры лежат в основе нуклеотидов ДНК и РНК, а биохимики все более убеждаются в том, что они существовали на Земле еще 4,5 млрд. лет назад, когда на ней зародилась жизнь. Служа «строительными блоками» более сложных органических структур, ПАУ могли сыграть важную роль в генезисе первых организмов.

нафталин

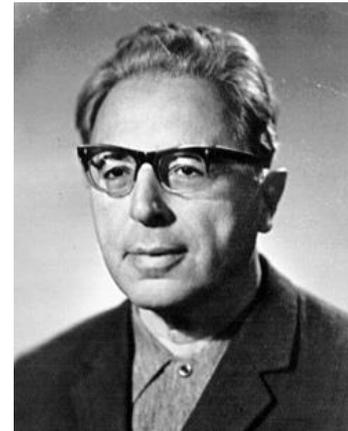


Молекулы в космосе

Большая часть всего, что окружает нас на прекрасной планете Земля, состоит из молекул. Мы сами с химической точки зрения – сложнейшие конгломераты разнообразных молекул.

А что в космосе?

- ☉ 100 лет назад — В космосе молекул нет, т.к. излучение звезд должно разрушить любую молекулу, появившись она в межпланетном или межзвездном пространстве.
- ☉ 1952 — должно быть много молекул
(*И.С.Шкловский*)
- ☉ 1937 — CH, CN, CH⁺ (оптические линии поглощения, *Swings + Rosenfeld*)
- ☉ 1960-е — OH, H₂O, NH₃,
- ☉ 2016 — известно ~200 молекул



Масса молекулярного газа в Галактике – $2 \times 10^9 M_{\text{Солнца}}$ (~1% M_{Γ})

Список молекул, найденных в межзвездной и околозвездной среде

2 atoms: AlF AlCl C₂ CH CH⁺ CN **CO** CO⁺ CP CS CSi HCl **H₂** KCl NH NO NS NaCl OH PN SO SO⁺ SiN SiO SiS HF SH

3 atoms: C₃ C₂H C₂O C₂S CH₂ HCN HCO HCO⁺ HCS⁺ HOC⁺ **H₂O** H₂S HNC HNO MgCN MgNC N₂H⁺ N₂O NaCN OCS SO₂ c-SiC₂ CO₂ NH₂ **H₃⁺** SiCN

4 atoms: c-C₃H I-C₃H C₃N C₃O C₃S C₂H₂ CH₂D⁺? HCCN HCNH⁺ HNCO HNCS HOCO⁺ H₂CO H₂CN H₂CS H₃O⁺ **NH₃** SiC₃

5 atoms: C₅ C₄H C₄Si I-C₃H₂ c-C₃H₂ CH₂CN **CH₄** HC₃N HC₂NC HCOOH H₂CHN H₂C₂O H₂NCN HNC₃ SiH₄ H₂COH⁺

6 atoms: C₅H C₅O C₂H₄ CH₃CN CH₃NC **CH₃OH** CH₃SH HC₃NH⁺ HC₂CHO HCONH₂ I-H₂C₄ C₅N

7 atoms: C₆H CH₂CHCN CH₃C₂H HC₅N HCOCH₃ NH₂CH₃ c-C₂H₄O CH₂CHOH C₇⁻(?)

8 atoms: CH₃C₃N HCOOCH₃ **CH₃COOH** C₇H H₂C₆ CH₂OHCHO

9 atoms: CH₃C₄H CH₃CH₂CN (CH₃)₂O **CH₃CH₂OH** HC₇N C₈H

10 atoms: CH₃C₅N? (CH₃)₂CO **NH₂CH₂COOH?**

11 atoms: HC₉N

13 atoms: HC₁₁N

На начало 2016 г известно около 200 видов молекул и несколько сотен изомеров (60 вне пределов Галактики).

<http://www.cv.nrao.edu/~awootten/allmols.html>

Спектры – паспорта молекул

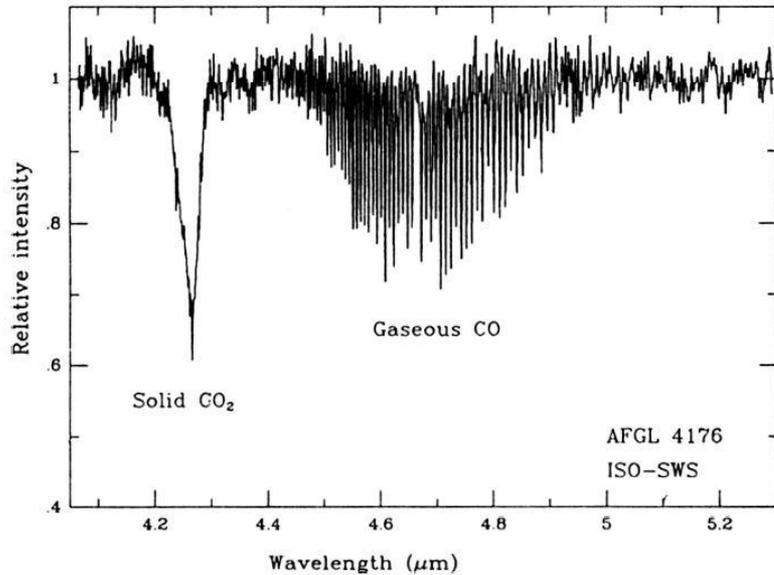
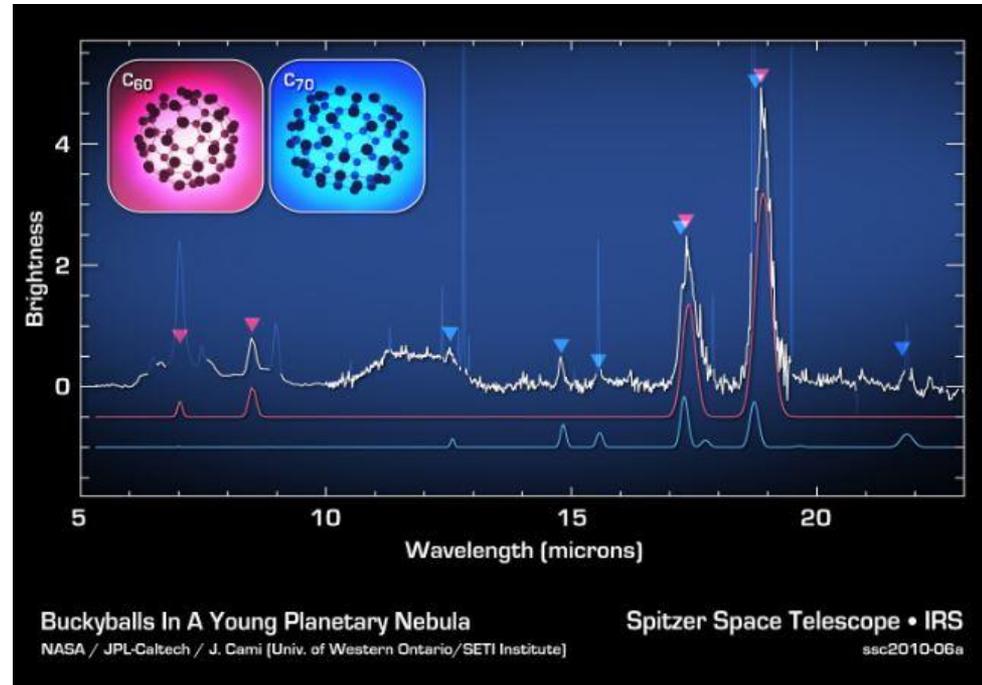
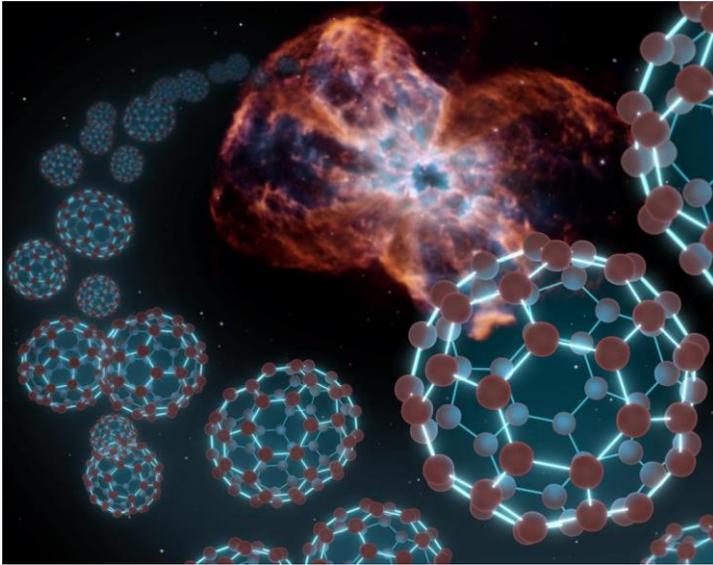


Fig. 10.9. Spectra obtained towards the massive young stellar object AFGL 4176 using the Infrared Space Observatory (ISO). The strong, largely structureless band absorption at $4.27 \mu\text{m}$ is due to solid CO_2 , whereas the characteristic vibration-rotation P- and R-branch structure between 4.4 and $4.9 \mu\text{m}$ is due to the presence of warm, gaseous CO along the line of sight. [Reproduced from E.F. van Dishoeck, in *The Molecular Astrophysics of Stars and Galaxies*, eds. T.W. Hartquist and D.A. Williams (Clarendon Press, Oxford, 1998).]

Сравнение спектра газа
CO и твердого (льда) CO₂



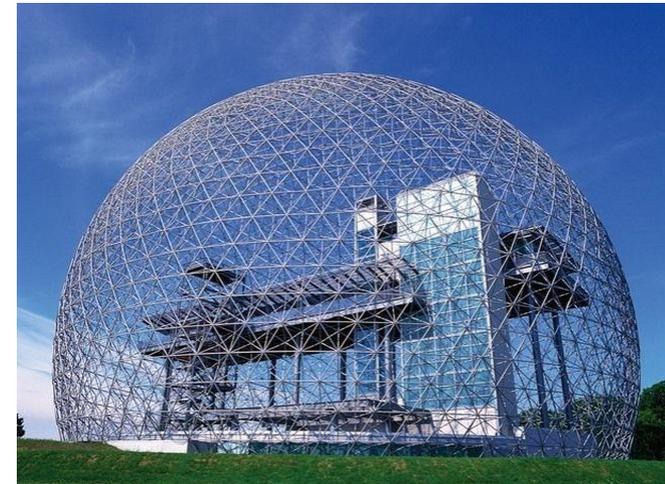
Спектры фуллеренов в
планетарной туманности



Фуллерены были впервые получены в лаборатории (1985, Нобелевская премия!). Позже они были обнаружены в космосе. на основе лабораторной спектроскопии сделали вывод, что диффузные межзвезд-ные полосы при 963,2 нм и 957,7нм и обусловлены C_{60}^+ в межзвездной среде. *Campbell+ 2015*

На Земле фуллерены образуются при горении природного газа и разряде молнии. Используются в качестве

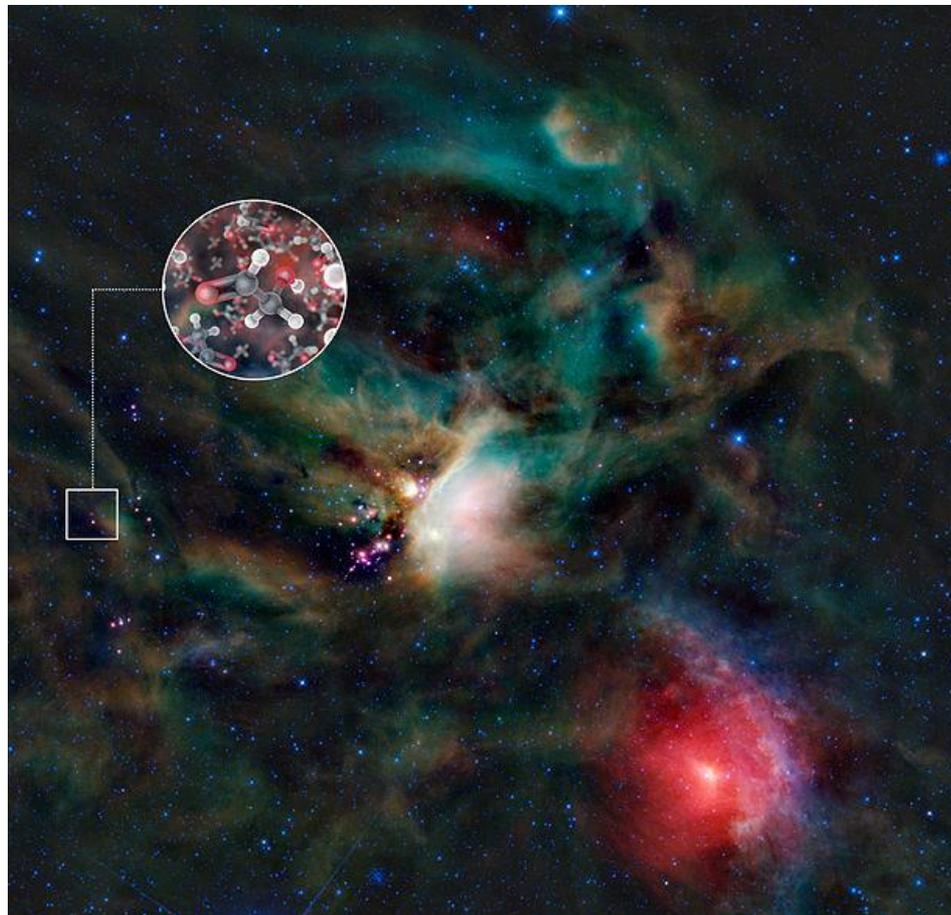
- материала для полупроводниковой техники
- добавки для роста алмазных плёнок
- сверхпроводящие соединения с C_{60}
- добавки фуллереновой сажи на антифрикционные и противоизносные свойства и.т.д.



*Монреальская Биосфера
Экспо-67
Ричард Фуллер*

Некоторые интересные новости

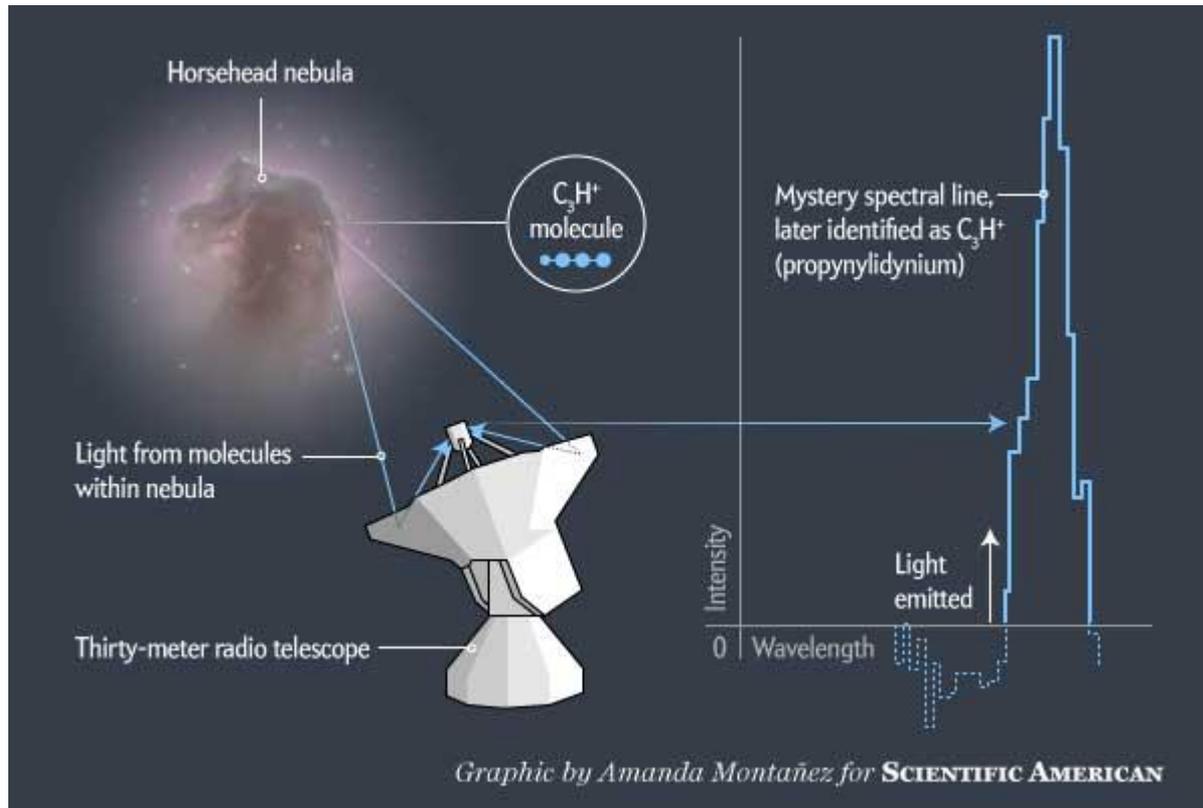
Астрономы на ALMA обнаружили молекулы гликолевого альдегида $C_2H_4O_2$ – простейшей формы сахара - в окрестностях молодой двойной звезды *IRAS 16293-2422*, которая имеет примерно такую же массу, что и наше Солнце. Этот простейший вид сахара мало чем отличается от того сахара, который мы привыкли класть в чай.



Область звездо-образования Rho Ophiuchi, наблюдалась в ИК – КА WISE. *Calsada+2012*



ALMA

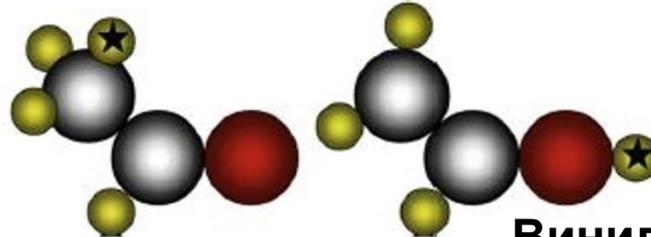


Много странных (не существующих на Земле) молекул были обнаружены в космосе. Например, [Rueff+2012](#) в IRAM обнаружили C_3H^+ . Другой пример - argonium (ArH^+) впервые синтезирован в лаборатории (80-х годах), в 2013 году нашли в космосе. Возможно, эта молекула является показателем области с очень высокой плотностью космических лучей.

Изомеры (примеры)

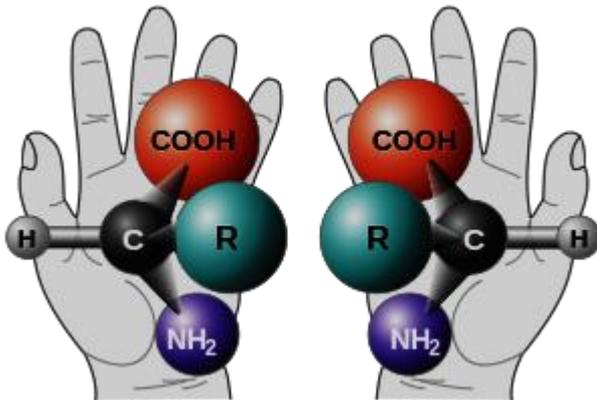
Ацетальдегид CH_3CHO

Ацетальдегид встречается в кофе, в спелых фруктах, хлебе, и синтезируется растениями как результат их метаболизма.

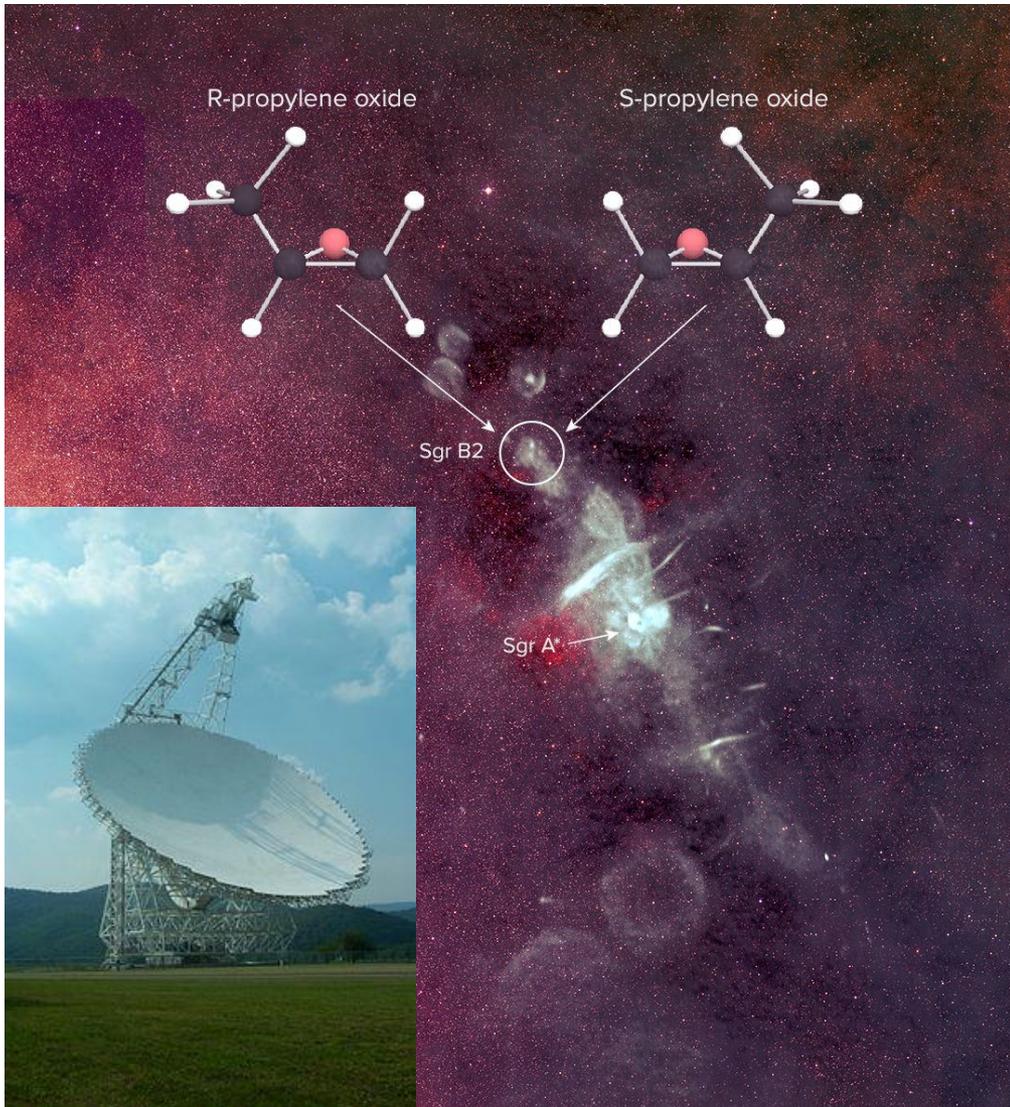


Винил алкоголь CH_2CHOH

Поливиниловый спирт (ПВС) широко применяется во многих отраслях промышленности.



Многие биологически активные молекулы являются хиральными, включая встречающиеся в природе аминокислоты (строительные блоки белков) и сахаров. В биологических системах, большинство из этих соединений имеют одинаковую хиральность: большинство аминокислот левовращающий (L), а сахара являются правовращающая (D).



Первое обнаружение хиральной молекулы, (пропиленоксид $\text{CH}_3\text{CHOCH}_2$) в межзвездном пространстве. Наблюдения проведены с помощью Green Bank Telescope, в области центра Галактики в Стрельце (Sgr) B2, *B. McGuire +2016.*

Обзорный проект *Prebiotic Interstellar Molecular Survey.*

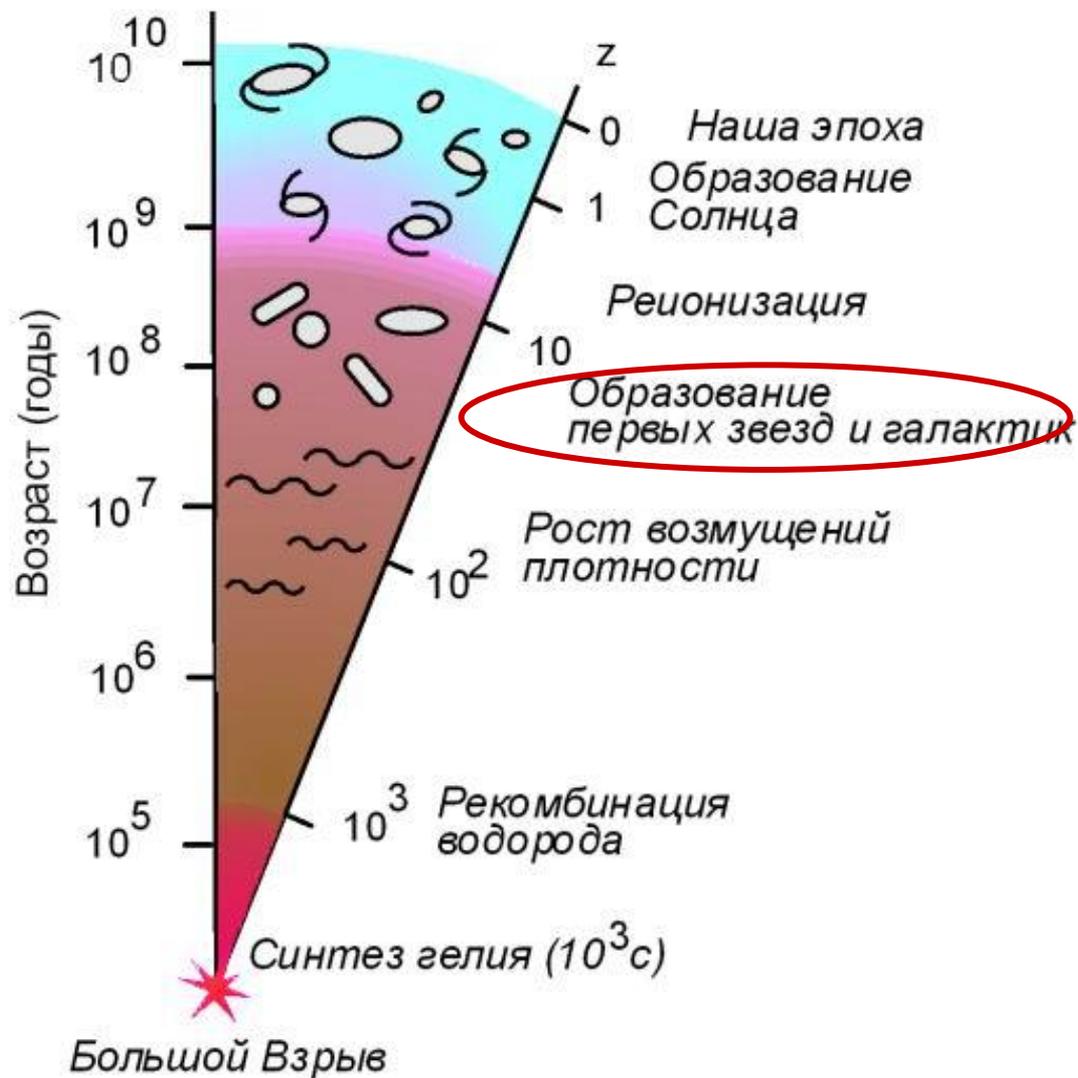
Молекулы и первые звезды

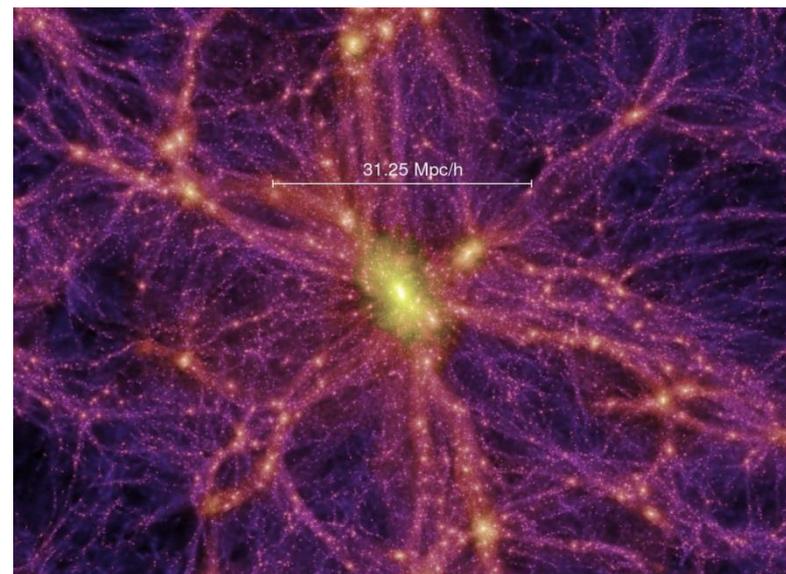
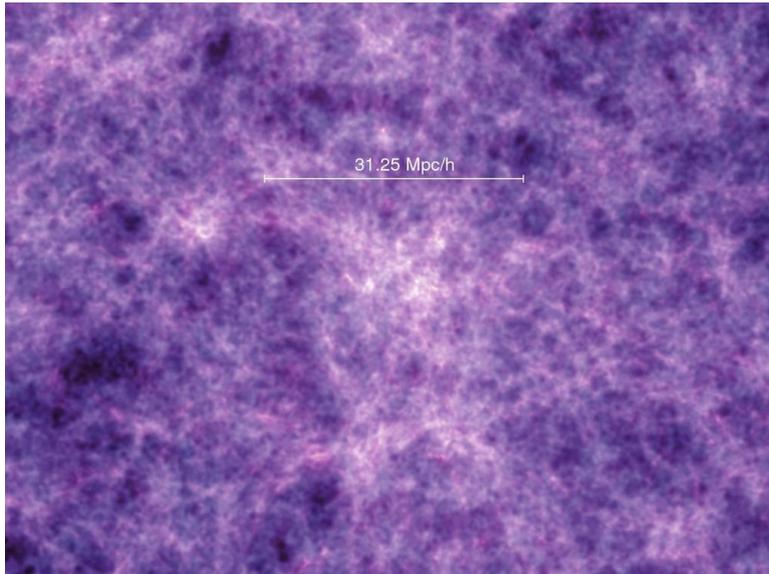
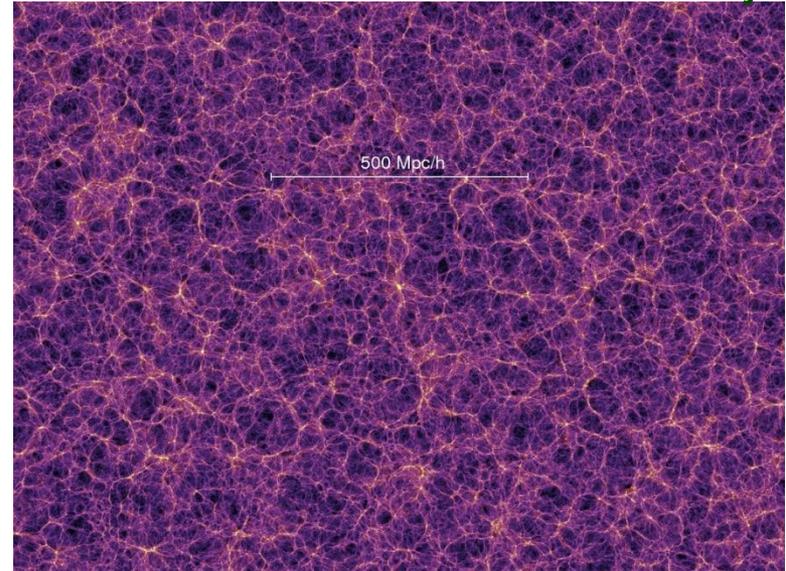
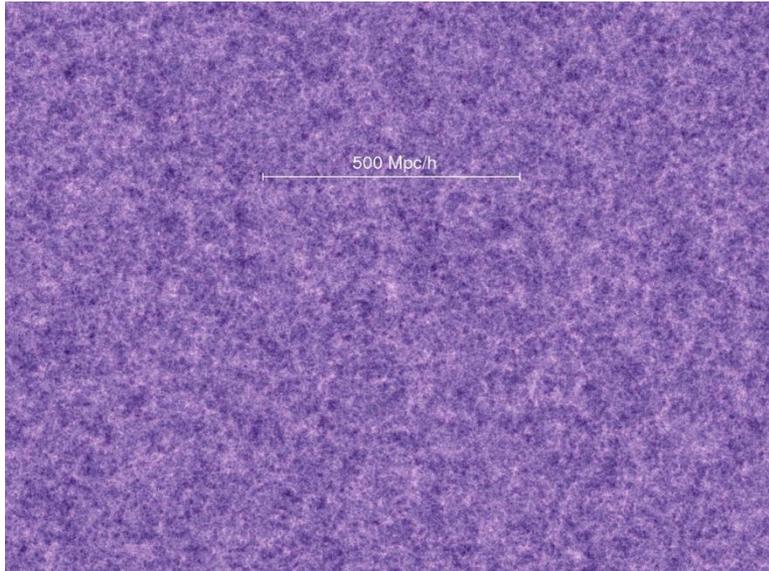
Из чего состоит Вселенная ?



Современные данные наблюдений флуктуаций температуры микроволнового фона, обзоров галактик на больших z , исследования межгалактической среды по линиям квазаров и удаленных сверхновых типа Ia позволили определить космологические параметры с очень высокой точностью.

История Вселенной

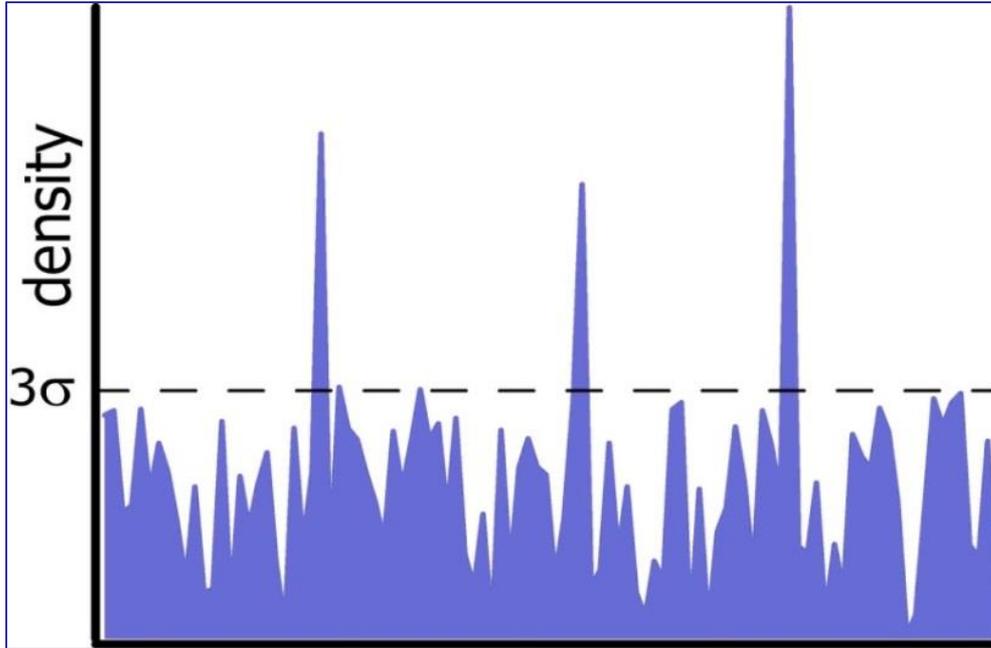




$z=18.3$ ($t = 0.21$ млрд. лет):

$z=0$ ($t = 13.6$ млрд. лет):

Гало темного вещества



Гравитационно-
связанные (устойчивые)
гало (сгустки) темного
вещества

Неустойчивые
флуктуации плотности
(рябь) темного
вещества

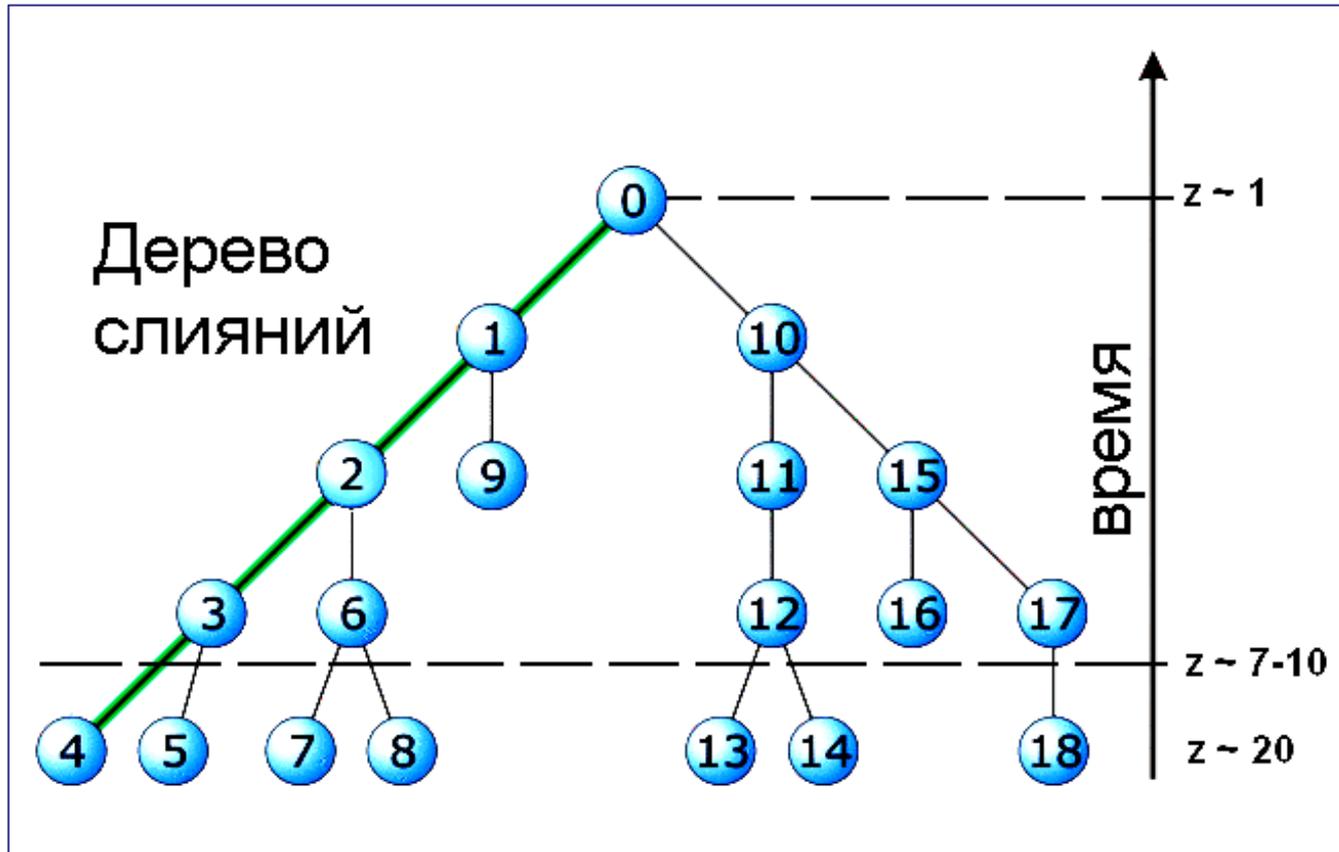
Результаты многочисленных теоретических исследований (в рамках Λ CDM модели) приводят к довольно четкому выводу:

первые гравитационно связанные структуры образуются на $z \sim 30-40$

и минимальная масса таких объектов (их часто называют “минигало”) $\sim 10^4 M_{\odot}$

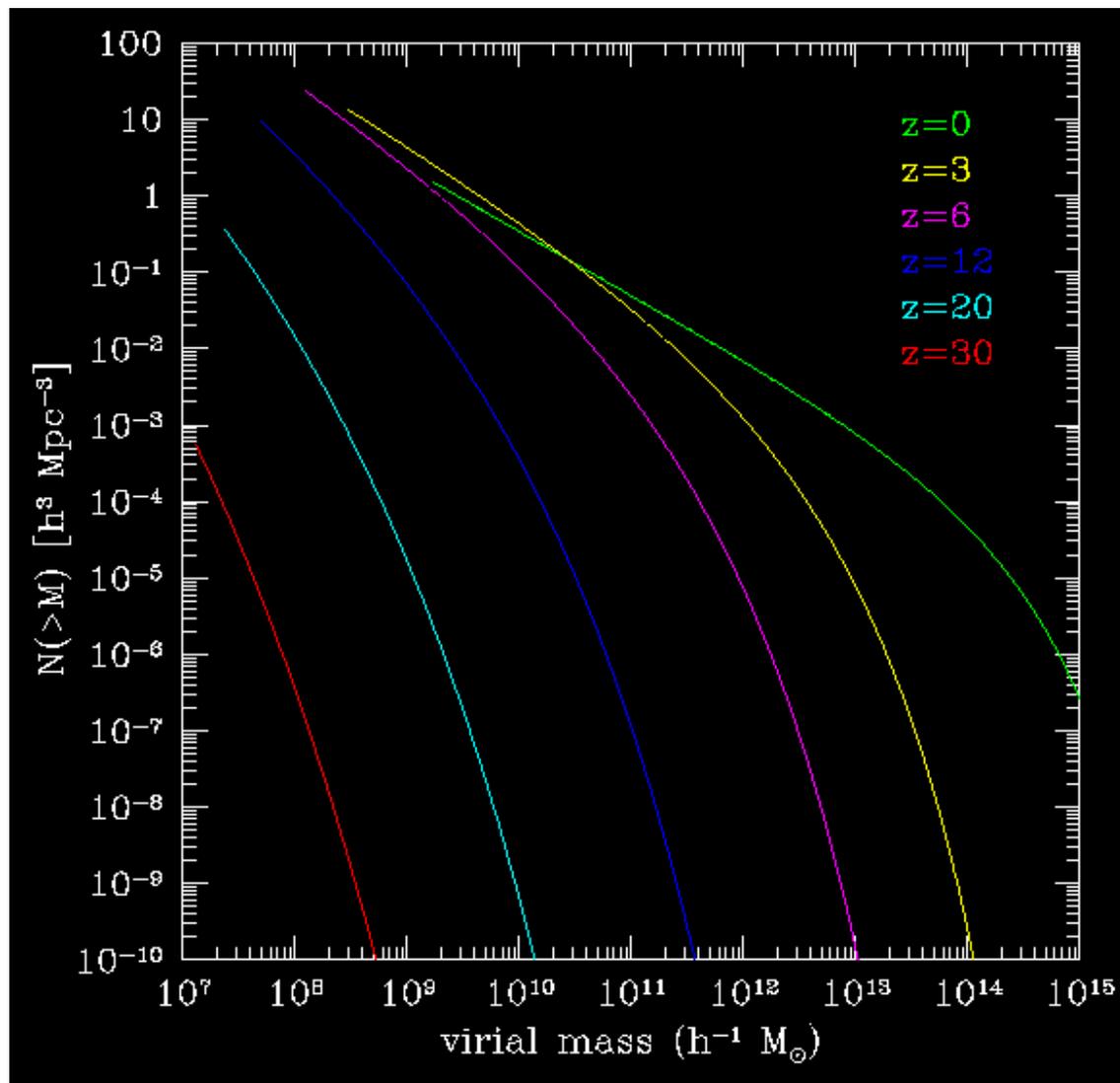
Эволюция ансамбля гало - bottom-up.

Процесс “bottom-up” слияний в эволюции темных гало (и галактик)



11+15 major merging (большое слияние)
9+1 minor merging (малое слияние)

*H.-W. Rix
3/2009
IMPRS
Heidelberg
Galaxies
Block
Course*



Эволюция распределения масс гало
темного вещества

Первые звезды

Барионный газ скапливался в потенциальных ямах, образованных минигало темной материи. В минигало с массами $M_{DM} > 10^5 M_{\odot}$ газ мог эффективно охлаждаться в основном посредством излучения в линиях H_2 .



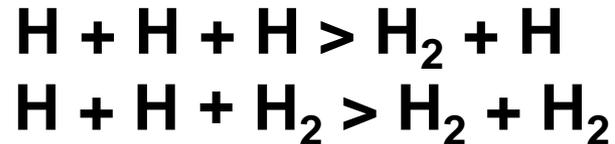
Artist's View of Star Formation in the Early Universe

Painting by Adolf Schaller • STScI-PRC02-02

В минигало, где мог охлаждаться газ, образовывались первые звезды (население III). Взрывы первых звезд постепенно увеличивали металличность газа и следующие поколения звезд были уже «нормальными».

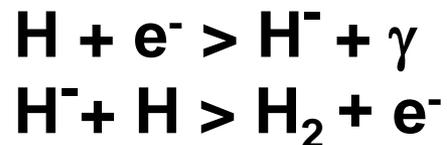
Чтобы получить звезду надо сжать газ, чтобы сжать газ – его надо охладить

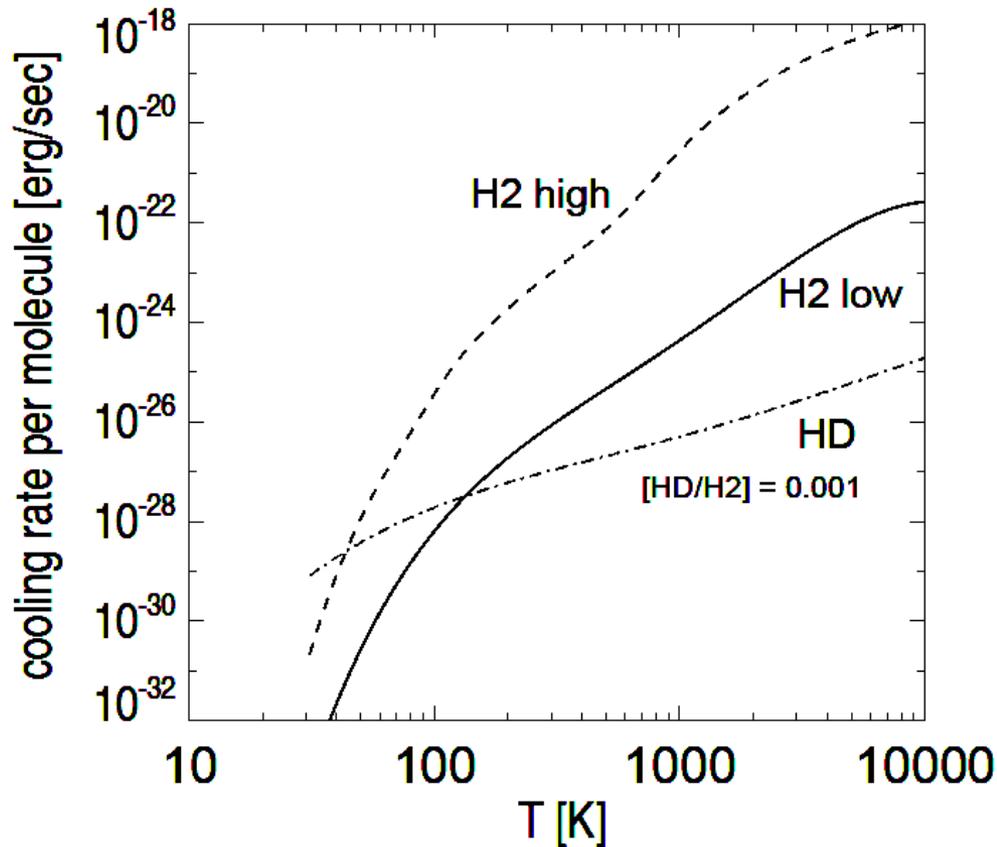
Первичный водородно-гелиевый газ может охладиться только благодаря излучению молекул H_2 . Эти молекулы могут образоваться в трехчастичных реакциях



при высокой плотности газа ($n_H > \sim 10^8 \text{ см}^{-3}$), так как скорости этих реакций малы.

При более низкой плотности «работают» реакции



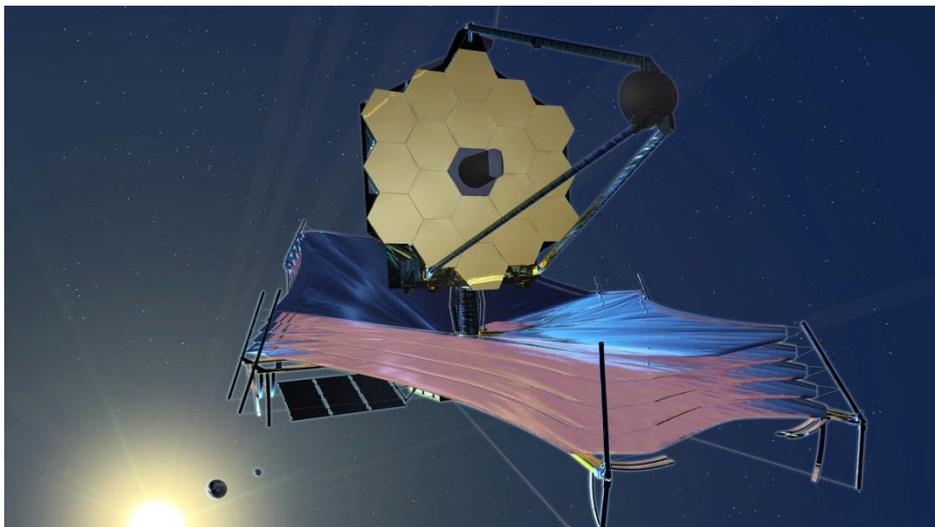
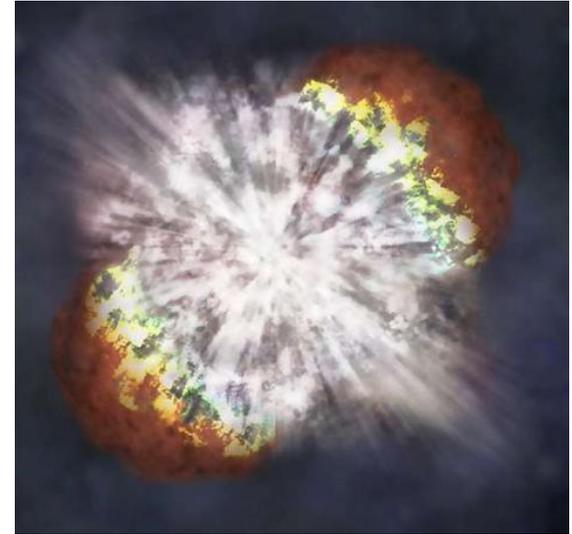


Yoshida et al. 2006

Скорости радиативного охлаждения на H_2 и HD (в расчете на молекулу) в пределе низкой плотности ($n_H = 1 \text{ cm}^{-3}$) - сплошная и штрих-пунктирная линии соответственно. Предполагается, что относительное содержание $HD/H_2 = 0.001$. Штриховой линией показана скорость охлаждения в пределе высокой плотности n_H .²⁹

Свойства и судьба первых звезд

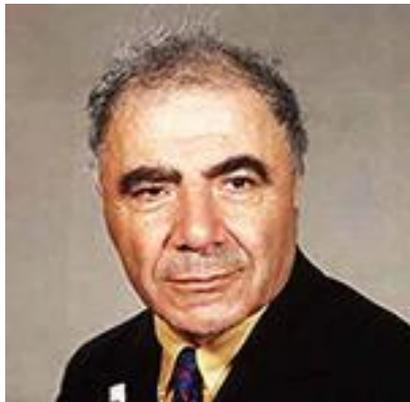
- Массивные ($M \sim 50 \div 1000 M_{\odot}$);
- Короткое время жизни ($\sim 10^6$ лет);
- Нулевая металличность ;
- Эпоха образования $z \sim 30 \div 20$;
- Остаток звезды – черная дыра или PISN;



Телескоп
Джеймса Вебба
(запуск 2018 г?)

Молекулы и звезды в нашу эпоху

Звезды образуются и в наши дни



Выдающееся открытие акад. В.А.Амбарцумяна сделано (1947) на основе данных, полученных на оптических телескопах, – звезды образуются в нашу эпоху и образуются они группами.

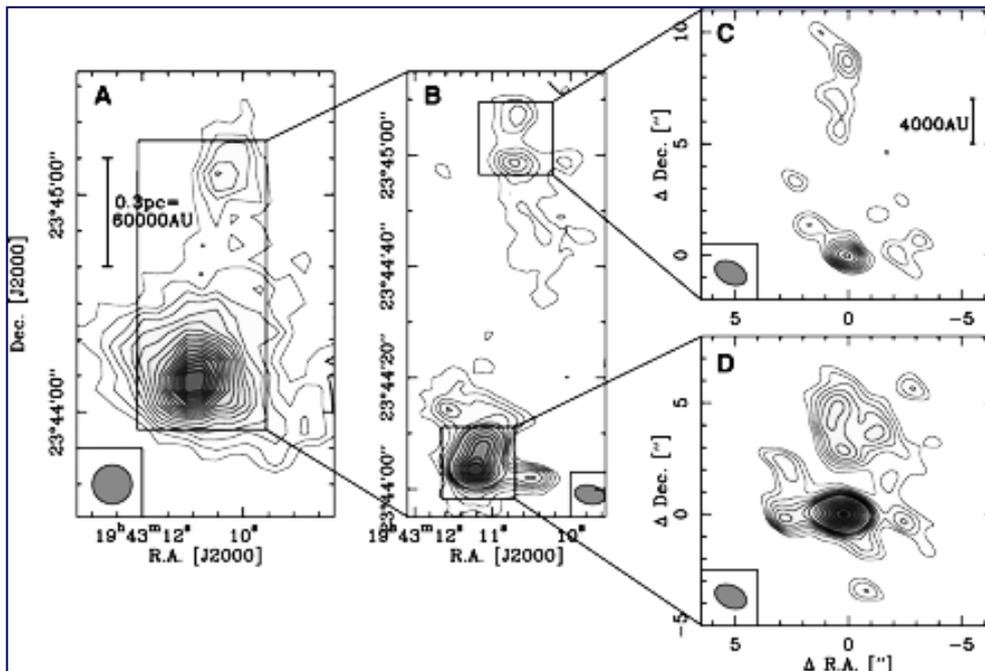
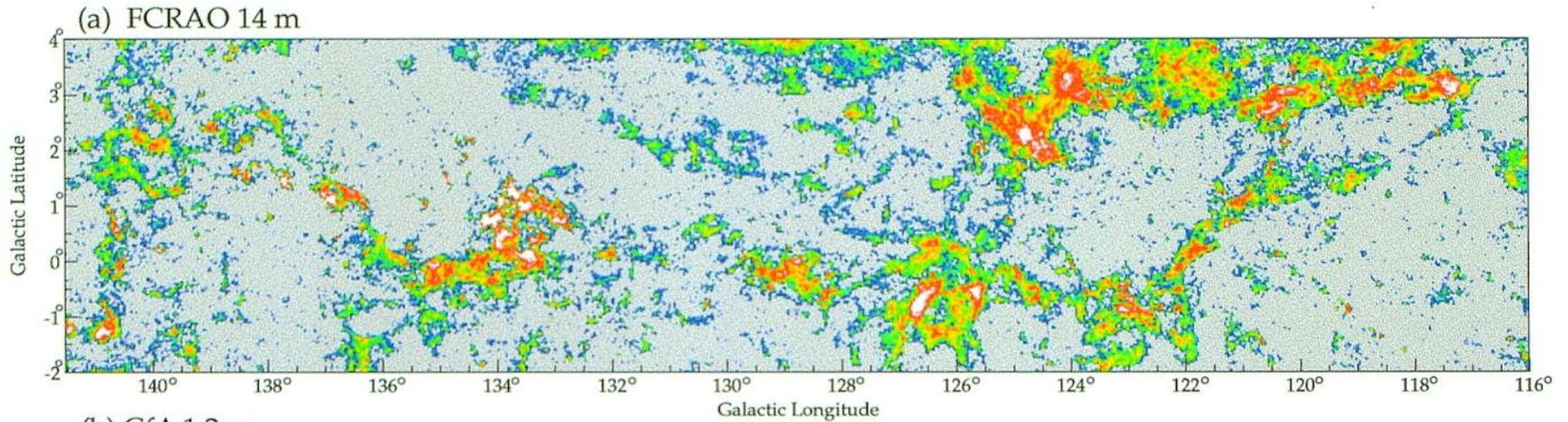


Теперь, когда наши знания не ограничиваются лишь наблюдениями в видимом участке спектра, мы знаем точно, что

1. Образование звезд – непрерывный процесс в течение всей эволюции нашей Галактики

2. Звезды образуются в самых плотных участках (ядрах) молекулярных облаков в процессе их сжатия.

Молекулярные облака



Фрактальность
молекулярных
облаков

$$P \propto A^{D/2}$$

$$D = 1.3 \pm 0.3$$

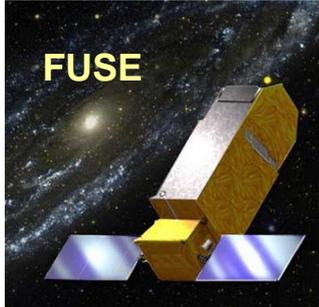
Beuther & Schilke 2004

Иерархия и свойства молекулярных облаков (МО)

	МО	Сгустки	Ядра
Масса, M_{\odot}	$6 \times 10^4 - 6 \times 10^6$	$10^2 - 10^3$	1–10
Размер, пк	20–100	0.2–4	0.1–0.4
Концентрация, см^{-3}	100–300	$10^3 - 10^4$	$10^4 - 10^6$
Температура, К	15–40	7–15	10 –100
Магнитное поле, мкГс	1–10	3–30	5 – 50
Ширина линий, км с^{-1}	6–15	0.5–4	0.05–0.4
Время сжатия t_{ff} , лет	$3 \cdot 10^6$	10^6	$5 \cdot 10^5$
Масса Джинса, M_{\odot}	100	10	1

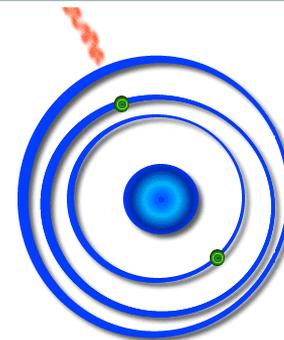
Сильная корреляция с пылью!

Наблюдения молекул в областях звездообразования

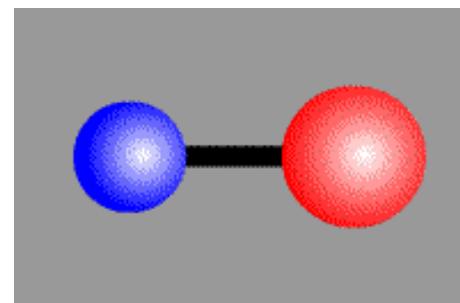
<i>Диапазон</i>	<i>Наблюдения</i>	<i>Объекты</i>	<i>Телескопы (примеры)</i>
Радио (см, мм, субмм)	Поглощение и эмиссия в линиях молекул, излучение холодной пыли.	Молекулярные облака, ядра МО, глобулы оболочки молодых звезд	 <p>IRAM30m</p>
ИК	Излучение и поглощение пылью, и некоторыми молекулами, ИК-спектры звезд.	Темные инфракрасные облака, ядра МО, глобулы, молодые звезды	 <p>Herschel</p>
УФ	Спектры (молодых) звезд, спектры поглощения МЗС и молекулярные полосы.	Молодые звезды, внешние области МО	 <p>FUSE</p>

Механизмы излучения молекул

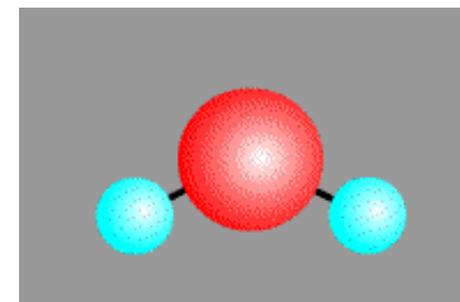
Электронные переходы (УФ, ближний ИК, видимый диапазоны - поглощение)



Колебательные переходы (ИК – эмиссия и поглощение)



Вращательные переходы (субмм, радио - эмиссия и поглощение)



Содержание некоторых молекул в ТМС-1 (по отношению к Н₂)

C	$1-10 \cdot 10^{-5}$	HCN	$2 \cdot 10^{-8}$
CO	$8-12 \cdot 10^{-5}$	HC₃N	$6-17 \cdot 10^{-9}$
H₂CO	$5 \cdot 10^{-8}$	CH₃CN	$5 \cdot 10^{-10}$
HCO⁺	$2-4 \cdot 10^{-9}$	NH₃	$2 \cdot 10^{-8}$
CH	$2 \cdot 10^{-8}$	N₂H⁺	$5-10 \cdot 10^{-10}$
C₂H	$3-10 \cdot 10^{-9}$	CS	$1 \cdot 10^{-8}$
C₃H	$2 \cdot 10^{-8}$	C₂S	$1 \cdot 10^{-8}$
C₄H	$1-4 \cdot 10^{-8}$	C₃S	$2 \cdot 10^{-9}$
C₃H₂	$1 \cdot 10^{-8}$	HCS⁺	$2 \cdot 10^{-9}$
CH₃OH	$2-4 \cdot 10^{-9}$	SO	$5 \cdot 10^{-9}$
CN	$3 \cdot 10^{-8}$	H₂O	$< 7 \cdot 10^{-8}$

Все молекулы по сравнению с молекулами Н₂ встречаются редко. Молекулярный водород – главная молекула в космосе, но она трудно обнаружима.

Молекулярная спектроскопия

Спектральные линии молекул в областях звездообразования рассматриваются как важный (часто единственный) источник информации о плотности, температуре, кинематике, химическом составе молодых объектов.

“Despite early promise, use of molecular lines from trace molecular species for this purpose has turned out to be severely hampered by the presence of significant variations in opacities, chemical abundances, and excitation conditions within dark nebulae. Yet, most of what we know of the physical conditions in molecular clouds derives from such studies.” Lada et al P&PV 2005

Критические плотности

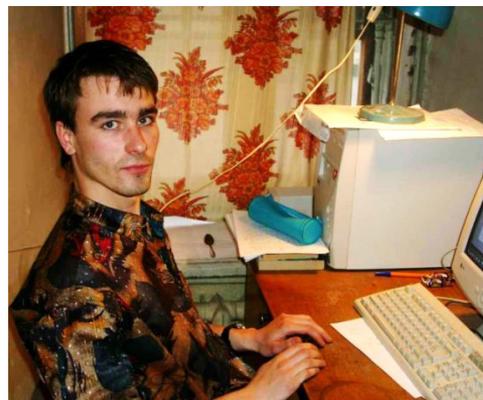
Молекула	Переход	Частота GHz	$n_{cr}(10\text{ K}),$ cm^{-3}	$n_{cr}(100\text{ K}),$ cm^{-3}
NH ₃	(1,1)	23.7	$1.8 \cdot 10^3$	$2.1 \cdot 10^3$
NH ₃	(2,2)	23.7	$2.1 \cdot 10^3$	$2.1 \cdot 10^3$
CS	$J = 1 \rightarrow 0$	49.0	$4.6 \cdot 10^4$	$6.2 \cdot 10^4$
CS	$J = 2 \rightarrow 1$	98.0	$3.0 \cdot 10^5$	$3.9 \cdot 10^5$
CS	$J = 3 \rightarrow 2$	147.0	$1.3 \cdot 10^6$	$1.4 \cdot 10^6$
CS	$J = 5 \rightarrow 4$	244.9	$8.8 \cdot 10^6$	$6.9 \cdot 10^6$
CS	$J = 7 \rightarrow 6$	342.9	$2.8 \cdot 10^7$	$2.0 \cdot 10^7$
CS	$J = 10 \rightarrow 9$	489.8	$1.2 \cdot 10^8$	$6.2 \cdot 10^7$
HCO ⁺	$J = 1 \rightarrow 0$	89.2	$1.7 \cdot 10^5$	$1.9 \cdot 10^5$
HCO ⁺	$J = 3 \rightarrow 2$	267.6	$4.2 \cdot 10^6$	$3.3 \cdot 10^6$
HCO ⁺	$J = 4 \rightarrow 3$	356.7	$9.7 \cdot 10^6$	$7.8 \cdot 10^6$
HCN	$J = 1 \rightarrow 0$	88.6	$2.6 \cdot 10^6$	$4.5 \cdot 10^6$
HCN	$J = 3 \rightarrow 2$	265.9	$7.8 \cdot 10^7$	$6.8 \cdot 10^7$
HCN	$J = 4 \rightarrow 3$	354.5	$1.5 \cdot 10^8$	$1.6 \cdot 10^8$

Группа астрохимии и звездообразования в Институте астрономии РАН



Д.Вибе

В.Шематович



Я.Павлюченков



М.Кирсанова



М.Мурга



А.Топчиева
Т.Молярова



Б.Шустов



В.Акимкин



Д.Ионов



О.Кочина

Как мы работаем

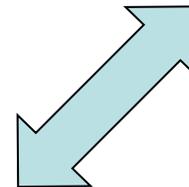
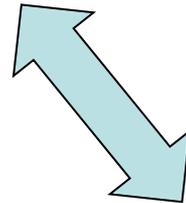
Наблюдения



Моделирование

1. Спектроскопия газа и пыли и построение изображений
2. Изучение молодых объектов в областях звездообразования

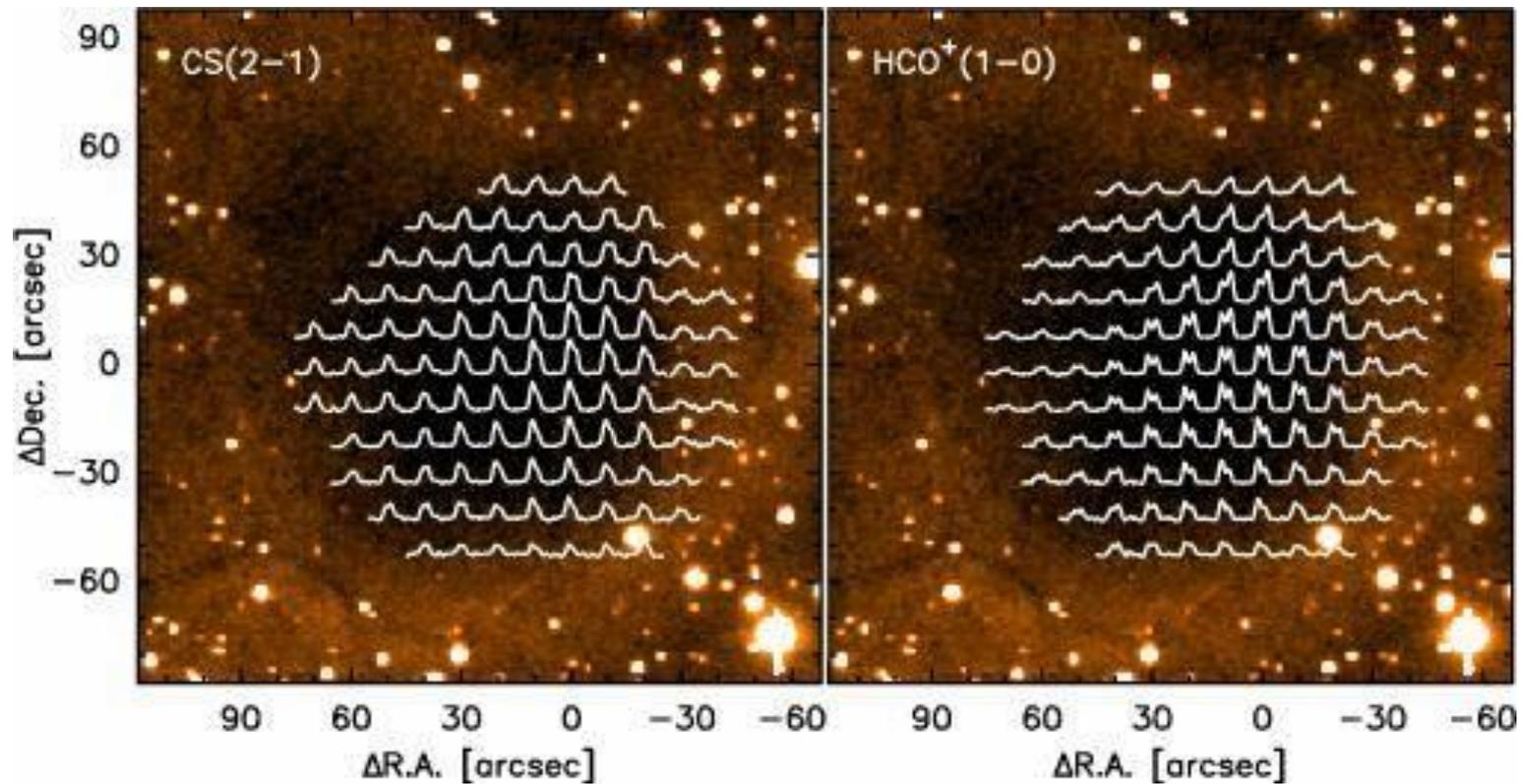
1. Модели переноса в линиях молекул
2. Построение химико-динамических эволюционных моделей



Лабораторные данные

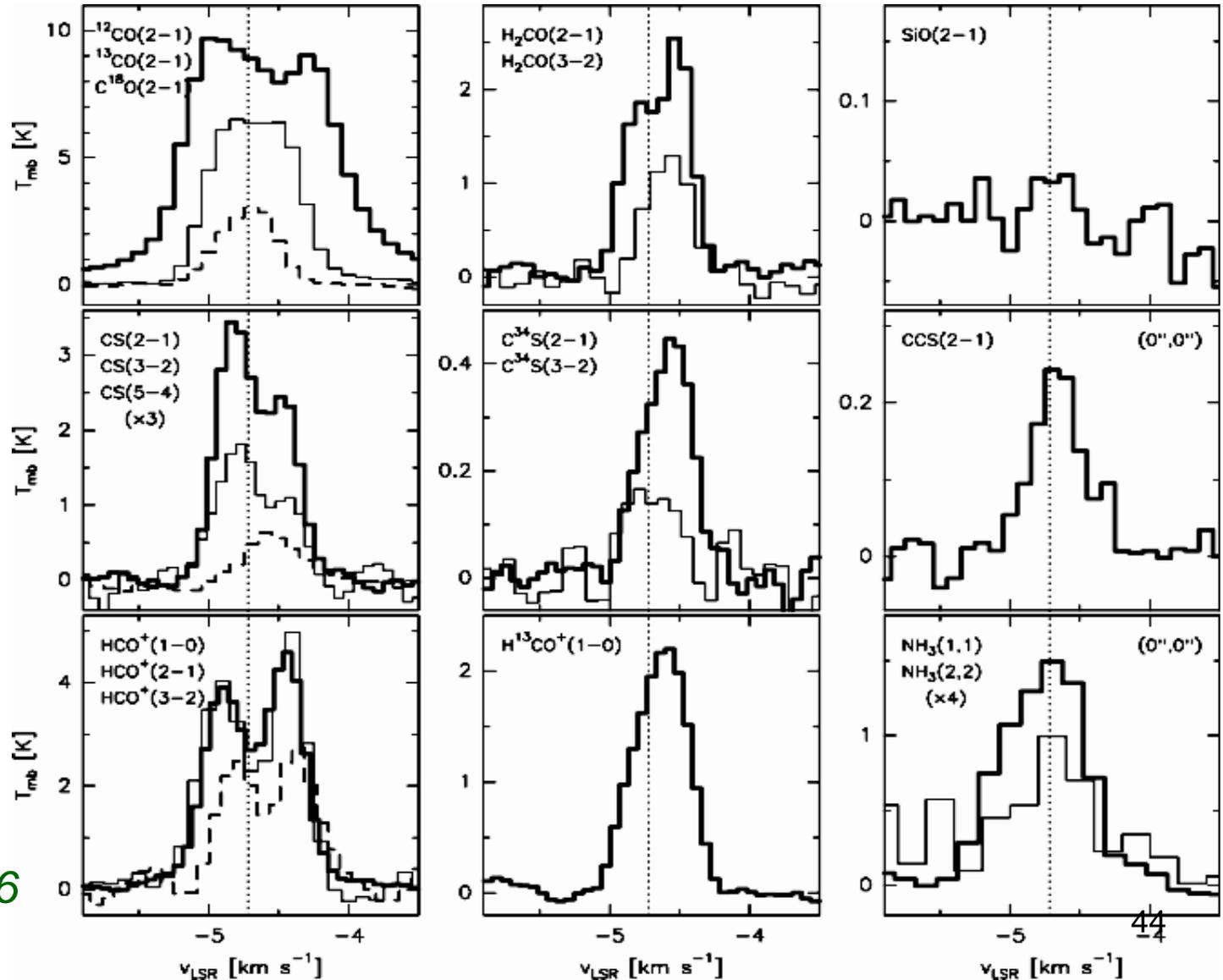
1. Измерения скоростей химических реакций газофазной и твердотельной лаборатория
2. Квантово-химические расчеты

Наблюдения



Наблюдения глобулы Бока CB17
Launhardt+ 2006

Наблюдения



Наблюдения
глобулы Бока
CB17

Launhardt+ 2006

Equations of LRT

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -\alpha_\nu I_\nu + j_\nu, \quad (1)$$

and a balance equation for the energy-level populations,

$$n_u \left[\sum_{l < u} A_{ul} + \sum_{l \neq u} (B_{ul} \bar{J}_{ul} + C_{ul}) \right] \quad (2)$$

$$= \sum_{l > u} n_l A_{lu} + \sum_{l \neq u} n_l (B_{lu} \bar{J}_{ul} + C_{lu}),$$

where I_ν is the spectral intensity of the radiation and n_k are the level populations. Equations (1) and (2) are related by the emission and absorption coefficients,

$$j_\nu^{ul} = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} n_u A_{ul} \phi_{ul}(\nu), \quad (3)$$

$$\alpha_\nu^{ul} = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} (n_l B_{lu} - n_u B_{ul}) \phi_{ul}(\nu), \quad (4)$$

and by the mean intensity of the radiation \bar{J}_{ul} , which is defined by the expression

$$\bar{J}_{ul} = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int_0^\infty I_\nu \phi_{ul}(\nu) d\nu. \quad (5)$$

In these formulas, A_{ik} and B_{ik} are the Einstein coefficients; C_{ik} , the coefficients for collisional excitation; ul , indices specifying the transition $u \rightarrow l$; and $\phi_{ul}(\nu)$, the line profile function, which is defined in the approximation of total redistribution over frequency and a Maxwellian turbulence spectrum as

$$\phi_{ul}(\nu) = \frac{c}{b\nu_{ul}\sqrt{\pi}} \quad (6)$$

$$\times \exp\left(-\frac{c^2(\nu - \nu_{ul} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\nu_{ul}/c^2)}{\nu_{ul}^2 b^2}\right).$$

Here, ν_{ul} is the central frequency of the transition $u \rightarrow l$; \mathbf{v} , the regular velocity; \mathbf{n} , a unit vector in the direction of the photon's propagation; and b , a parameter that is related to the kinetic temperature T_k and the most probable value of the microturbulent velocity V_t by the expression

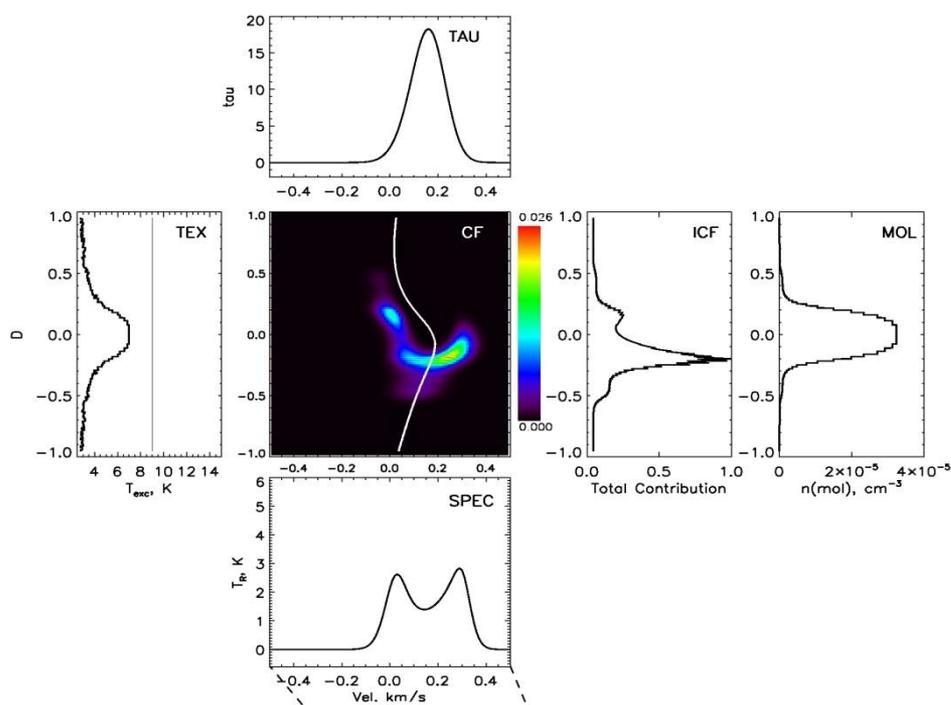
$$b^2 = \sqrt{\frac{2kT_k}{m_{mol}} + V_t^2}. \quad (7)$$

Модели переноса в линиях молекул

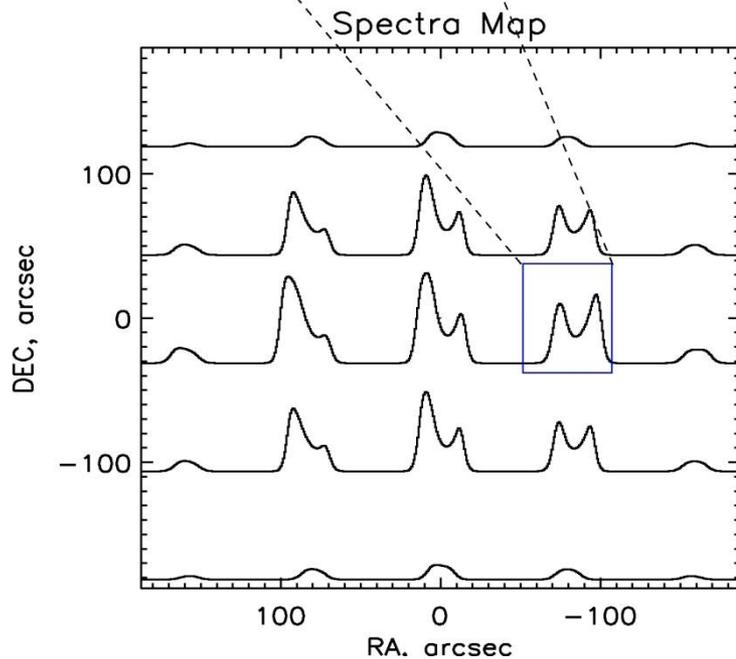
Difficulties:

- Non-linear integro-differential system of equations
- Non-local problem, where the cells are globally coupled
- In general, 6D problem

Карты вклада (не банковские!)



Карта вклада для анализа формирования выбранного спектра.



Спектральная карта в линии NCO+ (3-2) для модели дозвездного ядра.

Не всё так просто

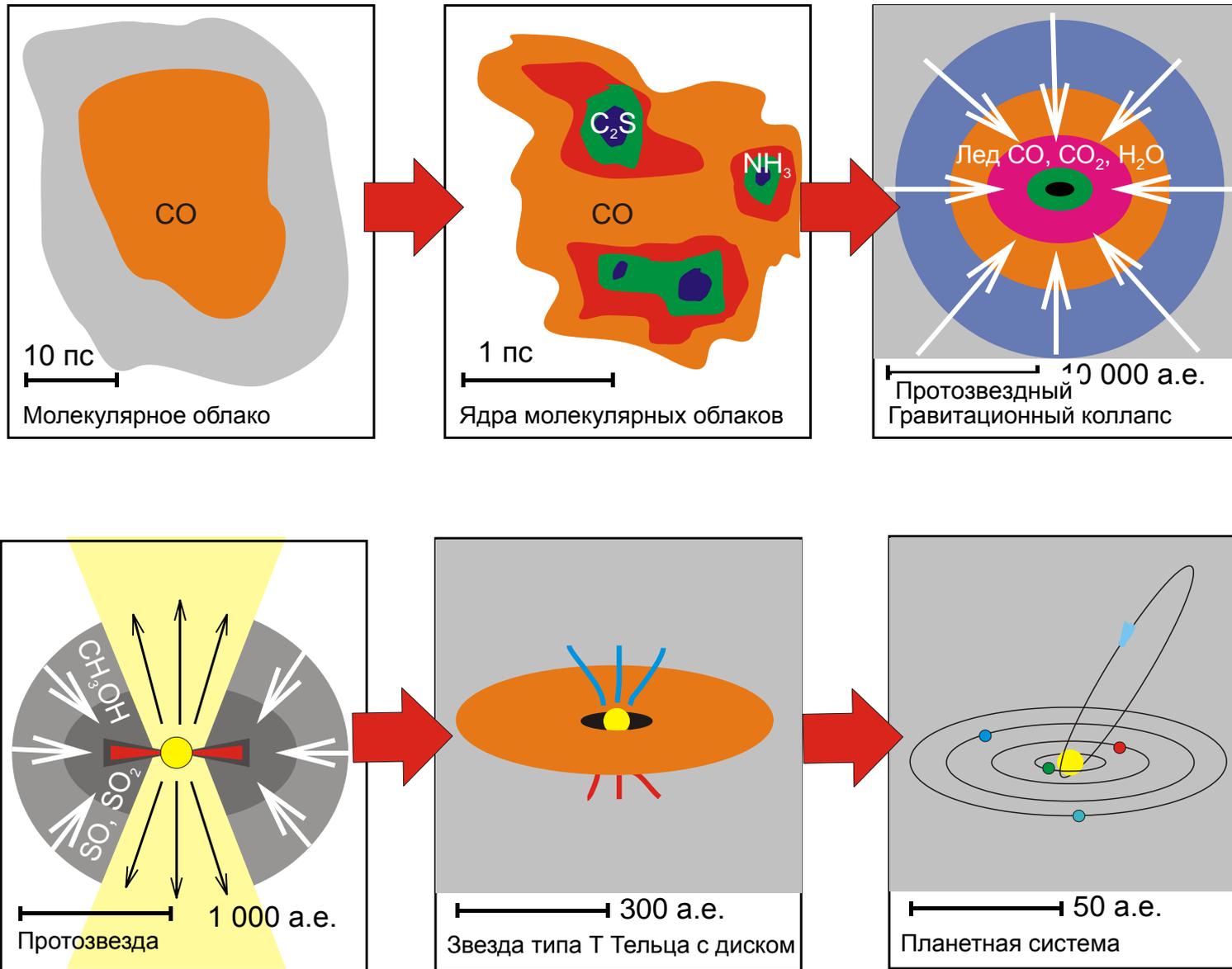
"Мы должны помнить, что то, что мы наблюдаем - не истинная природа сама по себе, а лишь то что мы представляем себе на основе наших наблюдений." W. Heisenberg



Интерпретация астрономических наблюдений сложных объектов и явлений – как правило приводит к решению обратной задачи. Для доказательства, что полученное решение единственное (правильное) нужна дополнительная информация.

В качестве дополнительной информации мы используем модели образования звезд.

Базовый сценарий звездообразования



Химико-динамические модели образования звезд

Три согласованно рассматриваемые составляющие решения общей проблемы образования и ранней эволюции звезд и околозвездных дисков:

ДИНАМИКА: двух-трехмерные магнито-гидродинамические модели протозвездной эволюции

АСТРОХИМИЯ: полтысячи молекулярных видов, более 7 500 реакций (см. следующие 2 слайда).

ПЕРЕНОС ИЗЛУЧЕНИЯ: сложная система интегро-дифференциальных уравнений. Многомерная, мультигрупповая задача.

Базы данных астрохимических реакций

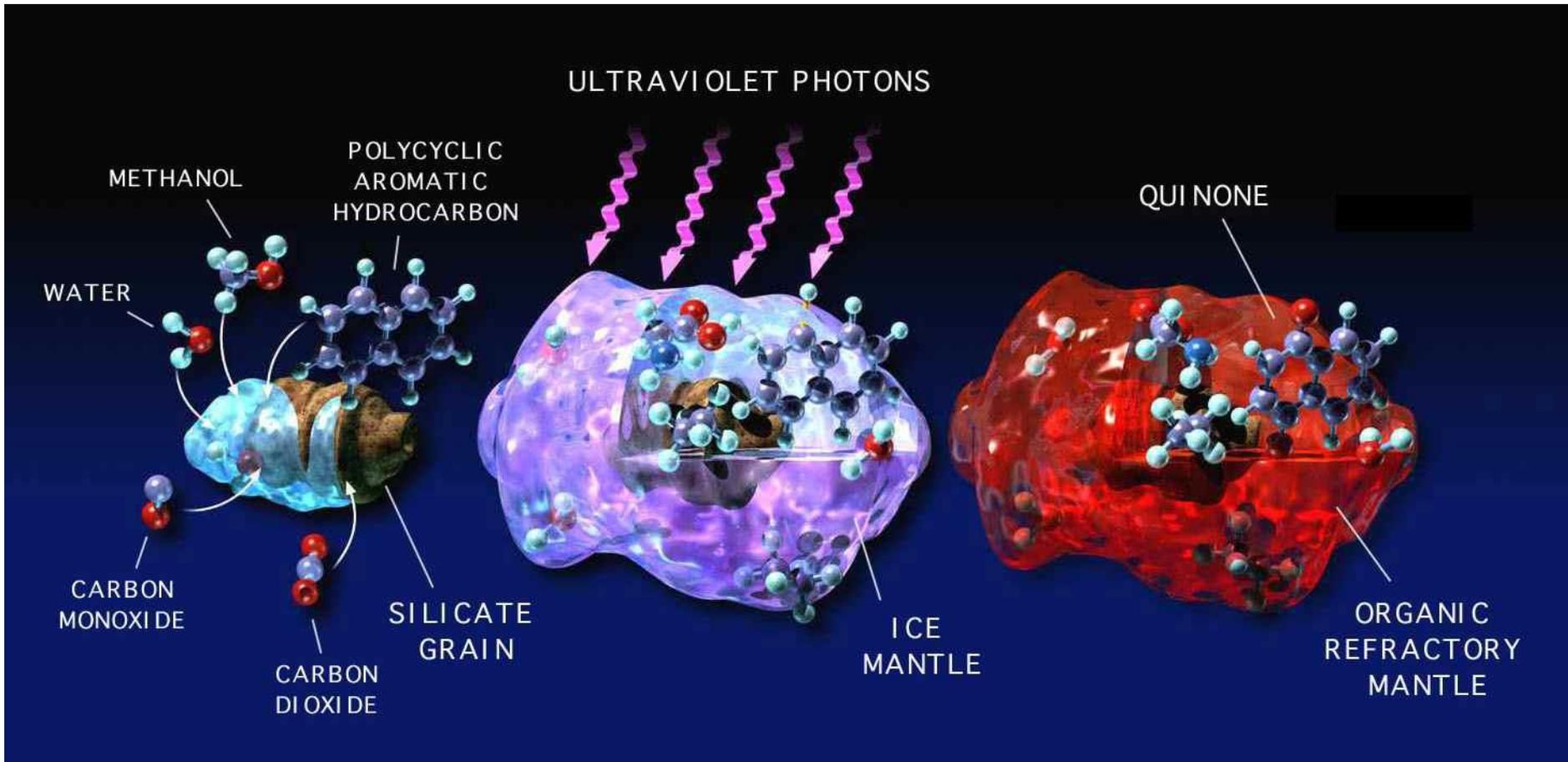
UMIST95, UMIST99, RATE06, UDFA (University of Manchester)

467 components & 6173 reactions (*McElroy et al. 2013*)

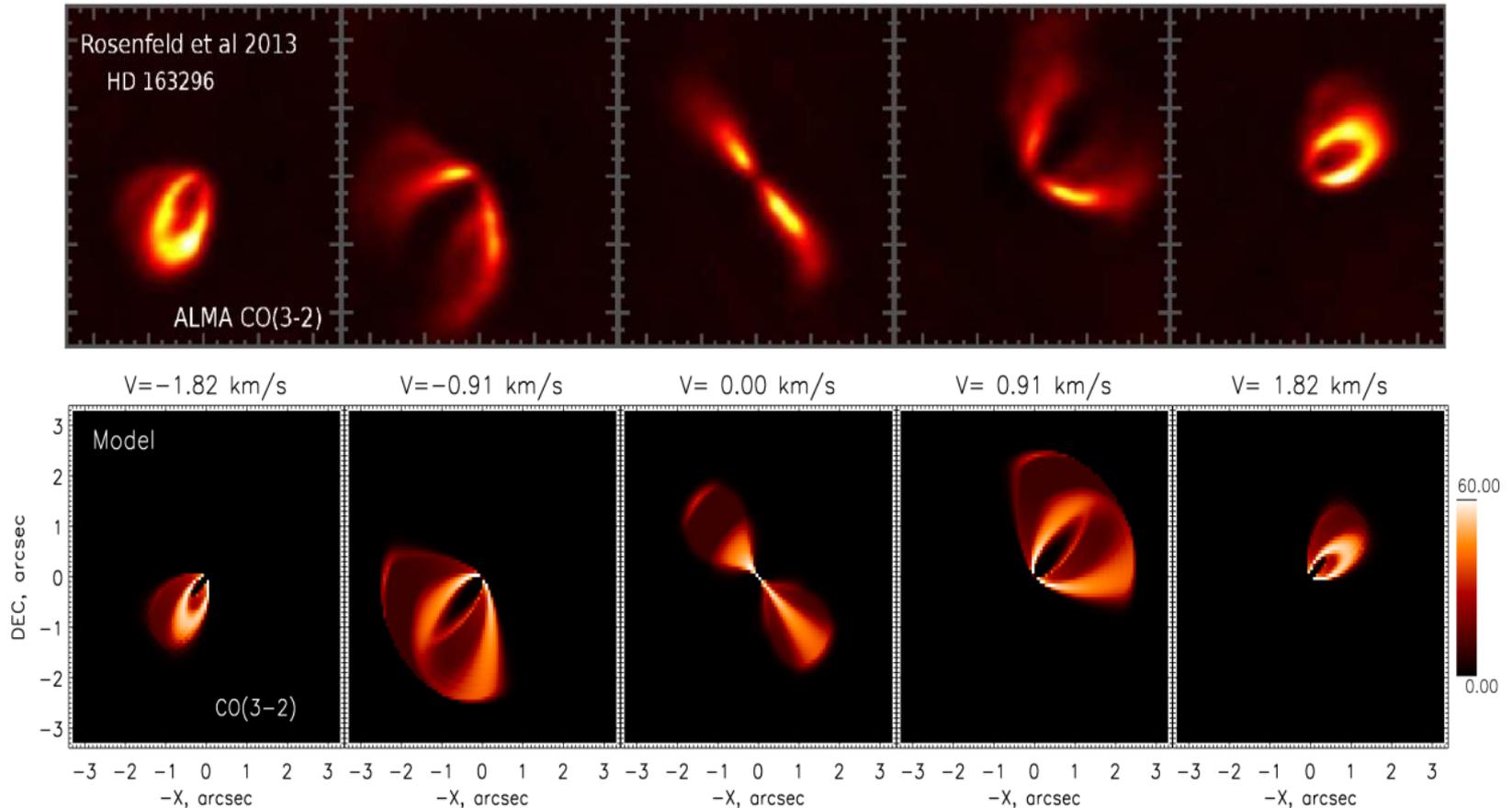
New Standard Model, OSU (Ohio State University),
KIDA

489 components & 7509 reactions (*Wakelam et al. 2012*)

Поверхностная химия (к истокам зарождения жизни)



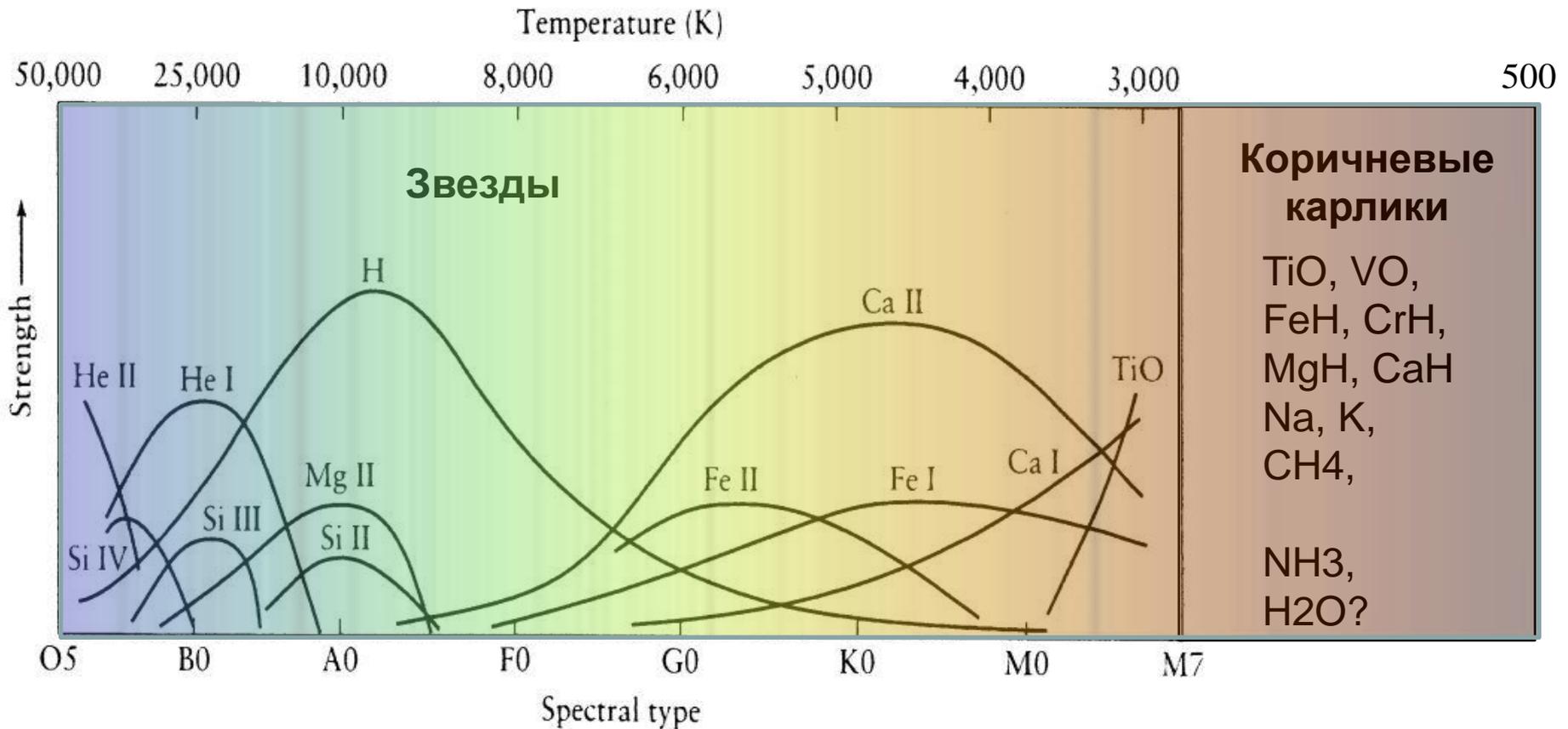
Протопланетный диск HD163296 (пример успешного предсказания наших моделей)



Верхняя панель: карта интенсивности в линии CO (3-2) протопланетного HD163296 диска, полученного с ALMA *Rosenfeld, 2013*. Нижняя панель: модель карты интенсивности в линии CO (3-2) CO (3-2) (*Semenov+ 2008, current study*).

Молекулы в звездах и возле звезд

Молекулы доминируют в спектрах холодных звезд



Молекулы в протопланетных дисках

Молекула	Параметр	Центральный слой	Молекулярный слой	Атмосфера	Зона планет
^{12}CO , ^{13}CO	Температура	мм*	мм	мм	ИК
H_2	Температура	0	0	0	ИК
NH_3	Температура	см	см	0	0
CS , H_2CO	Плотность	0	мм	0	ИК
CCH , HCN , CN	Ионизирующее излучение	0	мм	0	ИК
HCO^+	Степень ионизации	0	мм	0	0
N_2H^+		мм	0	0	0
C^+		0	0	ИК	ИК
сложная органика	Поверхностные процессы	ИК**	ИК-см	0	ИК, мм
DCO^+ , DCN , H_2D^+	Изотопное фракционирование	мм	мм	0	0

* – “мм/см” и “ИК” обозначают наблюдения в радио и инфракрасном диапазонах, соответственно.

** – Сложная органика, вымороженная или образованная в ледяных мантиях пылинок, может быть обнаружена в виде слабых линий поглощения на фоне сильного ИК-излучения центральной звезды. В газовой фазе ее легче всего наблюдать в радио-диапазоне, на (суб-)миллиметровых длинах волн.

Молекулы в атмосферах экзопланет

Gliese 436 b (GJ 436 b) — планета за пределами Солнечной системы у звезды Gliese 436, расположенной в созвездии Льва. Gliese 436 b удалена от Земли на расстояние 33 световых года. Является ближайшей известной на февраль 2015 года «транзитной» планетой.

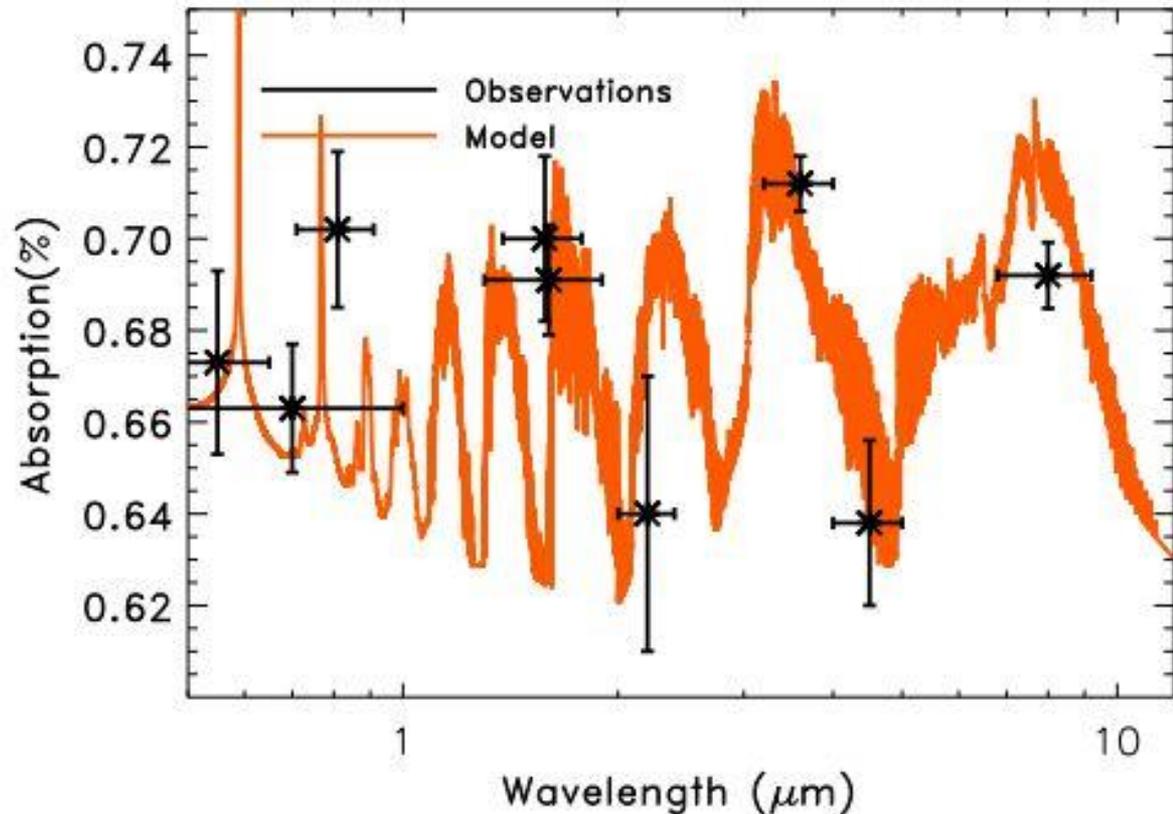


Figure 3. Simulated transmission spectrum of the transiting Hot Neptune GJ436b including the contribution of CH_4 , H_2 and alkali metals in the wavelength range 0.5-9 μm . The simulation is a good fit to the observations with Spitzer-IRAC at 3.6, 4.5 and 8 μm , together with data collected by EPOXI in the range 0.5 – 1.0 μm (Ballard et al., 2010), HST NICMOS in the range 1.2-1.8 μm (Pont et al., 2009), ground-based H-band (Alonso et al., 2008) and K-band (Càceres et al., 2009).

ВЫВОДЫ

1. Молекулы – это интересно!
2. Астрохимия – это интересно!
3. Образование звезд – это интересно!
4. Происхождение жизни – это, возможно, главная научная проблема!
5. Наука – неисчерпаема!