

УДК 524.57

## ВЛИЯНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МЕЛКОМАСШТАБНОГО ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЫЛИ НА ХИМИЧЕСКУЮ ЭВОЛЮЦИЮ МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЫ

© 2020 г. В. А. Соколова<sup>1,2,\*</sup>, А. И. Васюнин<sup>1,2,\*\*</sup>, А. Б. Островский<sup>1,\*\*\*</sup>, С. Ю. Парфенов<sup>1,\*\*\*\*</sup>

<sup>1</sup> Уральский федеральный университет им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Ventspils University College, VIRAC, Вентспилс, Латвия

\*E-mail: valeria.sokolova@urfu.ru

\*\*E-mail: anton.vasyunin@urfu.ru

\*\*\*E-mail: andrey.ostrovsky@urfu.ru

\*\*\*\*E-mail: sergey.parfenov@urfu.ru

Поступила в редакцию 26.03.2019 г.

После доработки 30.03.2020 г.

Принята к публикации 30.03.2020 г.

В работе анализируется влияние компактных газопылевых сгустков (“клампов”), в которые, предположительно, может собираться пыль в межзвездной среде, на химическую эволюцию диффузной среды. Для решения этой задачи проводится моделирование химической эволюции среды с физическими характеристиками, характерными для диффузных газопылевых облаков. Показано, что при использовании модели диффузной среды с клампами происходит возрастание обилий большинства наблюдаемых молекул по сравнению с моделью, предполагающей однородное распределение пыли. В некоторых случаях это приводит к улучшению согласия величин модельных обилий и их отношений с величинами, полученными из наблюдений. При этом нельзя говорить о том, что гипотеза о формировании пылью компактных сгустков позволяет качественно улучшить согласие между моделью и наблюдательными данными о химическом составе диффузной межзвездной среды. Однако диапазон значений физических параметров среды, при котором достигается наилучшее согласие между моделью и данными наблюдений, шире в предположении о том, что пыль формирует компактные газопылевые сгустки, а не перемешана с газом равномерно. Полученные результаты указывают на возможную значимость мелкомасштабных ( $\leq 1$  а.е.) неоднородностей межзвездной среды для ее химической эволюции.

DOI: 10.31857/S0004629920090066

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Атомарные и молекулярные диффузные облака являются важными для изучения объектами межзвездной среды, поскольку считается, что они представляют собой промежуточный этап при формировании более плотных холодных облаков и дальнейшего звездообразования [1, 2].

Диффузная среда характеризуется невысокими температурами газа (30–100 К) и сравнительно низкими плотностями (10–500 см<sup>-3</sup>) (см. [3]). Среда является проницаемой для межзвездного излучения: экстинкция в видимом диапазоне, как правило, не превышает 1<sup>m</sup>. В диффузной среде сложно выделить компактные объекты с четкими границами, что затрудняет анализ информации на луче зрения. Как следствие, современные знания о физических и химических процессах, происходящих в диффузных облаках, неполны.

Наблюдения показывают, что в диффузных облаках присутствуют молекулы, обилия которых превышают значения, предсказанные в моделях диффузной среды, и более характерны для холодной плотной среды (см., напр., [4–9] и др.). Наличие молекул с высокими концентрациями оказалось неожиданным, поскольку большую роль в химии диффузной среды играет межзвездное поле диссоциирующего излучения, которое должно эффективно разрушать формирующиеся молекулы.

Таким образом, в рамках традиционного предположения о равномерно перемешанной пыли и газе в диффузной среде решение задачи о воспроизведении наблюдаемых обилий молекул сталкивается с рядом трудностей. Однако недавно в работе [10] было показано, что в диффузной и плотной среде при наличии внешнего поля излучения и/или иных механизмов, поддерживающих про-

цессы ионизации в среде, возникают особого вида неустойчивости (ионная экранировка или “ion shadowing force”), способные привести к неоднородному распределению пыли по объему облаков и формированию компактных сгустков, в которых концентрируется межзвездная пыль. При этом пространство между сгустками становится свободным от пыли.

В этой работе мы анализируем особенности химической эволюции при использовании модели диффузной среды, включающей в себя “клампы” — компактные холодные газопылевые облака радиусом  $R_c \leq 1$  а.е., в которых сконцентрирована вся межзвездная пыль. Оценки температуры пыли в клампах мы взяли из [11]. Основываясь на оценках из работ [10, 12], мы предполагаем, что температура газа в клампах равна температуре пыли, и соответственно значительно ниже температуры газа в случае среды без клампов. Это оказывает влияние на химические процессы, происходящие на поверхности пылевых частиц: в клампах скорость аккреции атомов и молекул на поверхность пыли выше, чем в случае среды без клампов, поскольку холодный газ при условии гидростатического равновесия с окружающей более горячей средой должен быть более плотным. Интерес представляет то, насколько присутствие клампов повлияет на процессы химической эволюции диффузной межзвездной среды, и можно ли с помощью модели с клампами объяснить расхождения наблюдательных данных о содержании молекул в диффузной межзвездной среде и результатов, получаемых при использовании других моделей.

Статья организована следующим образом. Раздел 2 посвящен краткому описанию механизма возникновения компактных газопылевых клампов. Также в разделе описываются детали химической модели, включая механизм учета наличия клампов в среде. Раздел 3 посвящен описанию результатов моделирования. Наконец, в разделе 4 проводится обсуждение полученных результатов моделирования, их сравнение с данными наблюдений, а также формулируются выводы из проведенного исследования.

## 2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

### 2.1. “Кламповая” модель диффузной среды

В работе [10] было показано, что газопылевая среда при наличии механизмов ионизации (например, поля УФ-излучения, космических лучей) нестабильна и может формировать компактные пылевые сгустки (“клампы”), размеры которых могут варьироваться от долей до десятков астрономических единиц [10]. В этом подразделе мы кратко рассматриваем основные положения гипотезы о формировании компактных газопы-

левых сгустков, а также следствия из нее, важные для моделирования химической эволюции среды с клампами.

В работе [10] формирование клампов в среде объясняется возникновением неустойчивости в плазме, содержащей пылевые частицы [13–15]. Эта неустойчивость вызывается затеняющей силой притяжения (attractive shadowing force) — результат коллективных взаимодействий между пылевыми частицами в газовой среде. Свой вклад в силы затенения вносят как ионизированные, так и нейтральные газовые компоненты: ионы, которые рекомбинируют с электронами на поверхности пылевых частиц, всегда приводят к возникновению притяжения между частицами пыли, в то время как знак величины силы между пылевыми частицами, вызванной взаимодействием с нейтральными атомами и молекулами, зависит от разности температур пыли и газа. Пылевые частицы будут притягиваться за счет взаимодействия с нейтральными компонентами газа, если температура газа  $T_{\text{gas}}$  выше, чем температура поверхности пыли  $T_{\text{dust}}$ , и отталкиваться, если наоборот [16]. В областях диффузной среды, где температура газа  $T_{\text{gas}}$  превышает 100 К, в то время, как температура пыли  $T_{\text{dust}}$  не превышает 20 К, нейтральное затенение (neutral shadowing) вызывает притяжение между частицами [12].

В низкотемпературной плазме и при умеренном УФ-излучении пылевая частица в плазме приобретает отрицательный заряд. Стационарный заряд пылинки определяется балансом потоков ионов и электронов на ее поверхности. При наличии значительного поля УФ-фотонов стационарный заряд пылинки становится положительным. Механизм, ведущий к развитию неустойчивости в среде при наличии заряда на пыли в плазме, действует аналогичным образом как при положительном, так и при отрицательном стационарном заряде пылинок.

Силы затенения (shadowing forces) сжимают пыль в компактные облака, где равновесие достигается за счет взаимного электростатического отталкивания между заряженными пылинками. Плотность пыли внутри облака может быть на много порядков выше, чем средняя плотность пыли в случае однородного распределения пылевых частиц: например, максимальное значение отношения плотности пыли внутри клампа к плотности пыли в однородном случае для пылинки размера  $\sim 0.03$  мкм достигает  $\sim 10^7$ . Несмотря на такую высокую локальную плотность, слипания пылинок внутри облаков практически не происходит из-за сильного электростатического отталкивания между пылевыми частицами, имеющими заряды одинакового знака.

Поскольку концентрация пыли в клампах высока, температура газа в них становится равной температуре пыли. Это связано с тем, что плотные пылевые облака охлаждают содержащийся в них газ за счет частых столкновений с пылью, которая, в свою очередь, охлаждается за счет собственного теплового излучения [10]. Выполнение условия равновесия по давлению с более горячим окружением приводит к большей плотности газа в клампах по сравнению с окружающей диффузной средой.

В работе [10] показано, что для типичных условий диффузной среды (плотность газа  $\sim 100 \text{ см}^{-3}$ , температура газа  $\sim 100 \text{ К}$ , оптическая экстинкция  $\sim 1^m$ ) размеры клампов не могут превышать 1 а.е. Средняя плотность пыли в таких облаках на 6–7 порядков величины превышает среднюю плотность пыли, которая была в окружающей среде до образования клампов [12]. Среднее расстояние между такими облаками в среде  $L_{cl}$  в  $\sim \sqrt[3]{n_d^{cl}/n_d^0}$  раз больше их характерного размера  $R_c$ , который в свою очередь обратно пропорционален локальной плотности газа. Здесь  $n_d^{cl}$  – числовая плотность пыли внутри клампа, а  $n_d^0$  – средняя числовая плотность пылинок в однородной среде (имеется в виду случай, когда в среде нет клампов). Локальная плотность газа внутри облака увеличивается в  $T_g/T_d$  раз по отношению к плотности газа в окружающей среде, где  $T_g$  – температура газа в окружающей среде,  $T_d$  – температура пыли в клампе. Объем газа в клампах составляет  $\approx 10^{-6}$  от объема газа всего облака, а расстояние между клампами – примерно в  $10^2$  раз больше их размера. Между облаками пыль практически отсутствует, а плотность газа между клампами почти не изменяется (не зависит) от образования клампов: т.е. она равна плотности газа в “однородном” случае (см. детальное обсуждение в работе [12]).

### 2.2. Модификация стандартной астрохимической модели для расчета химической эволюции среды с клампами

В однородной диффузной среде температура газа больше температуры пыли [3]. В самих клампах температуры газа и пыли вследствие высокой концентрации пылинок и эффективного обмена энергией между частицами газа и пыли становятся равными. Данный факт оказывает влияние на химические процессы, проходящие на поверхности пылевых частиц: в клампах скорость аккреции атомов и молекул на поверхность пыли оказывается в  $\sqrt{T_g/T_d}$  раз больше, чем в случае однородной среды без клампов. Поскольку вся пыль

сосредоточена в клампах и газ в них холодный, то, хотя в среде и есть горячий газ между клампами, химические процессы на поверхности пыли протекают в условиях, характерных для клампов, т.е. при более высокой плотности и более низкой температуре окружающего пылевого газа. Таким образом, предполагая, что характерное время перемешивания газа между клампами и межкламповой средой меньше характерного времени изменения содержания атомов и молекул в среде вследствие протекающих в газе химических реакций, моделирование химической эволюции межзвездной среды в предположении о наличии описанных выше клампов можно проводить стандартной астрохимической моделью (например, моделью MONACO [17] или аналогичными моделями), в которую необходимо внести следующие модификации. Во-первых, скорость аккреции атомов и молекул на поверхность пылевых частиц в модели необходимо увеличить в  $\sqrt{T_g/T_d}$  раз по сравнению со стандартной моделью, описывающей однородную газопылевую смесь. Во-вторых, температуру газа при моделировании необходимо задать равной температуре пыли в клампах. В следующей секции приведено детальное описание характеристик используемой модели.

### 2.3. Методы расчета содержаний химических компонентов

Для расчета относительных обилий молекул и атомов в среде использовался вычислительный код MONACO [17], реализующий метод балансирования уравнений и обладающий возможностью моделирования химии в газе и на поверхности пыли при нестационарных условиях. Код рассчитывает изменение относительного обилия для каждого атома или молекулы за выбранный промежуток времени. Мы также использовали базу данных о кинетике химических реакций, заимствованную из работы [17], включающую 638 молекул и 6002 реакции, 216 из которых являются реакциями на поверхности пыли.

При расчете взаимодействия между газом и пылью учитывались аккреция нейтральных частиц на поверхность пыли, тепловая и фотодесорбция частиц с поверхности пыли, диссоциативная рекомбинация ионов на заряженной пыли. Пылевая частица в модели представляет собой однородную сферу размером 0.1 мкм, состоящую из аморфного силиката; отношение массы пыли к массе газа в моделях составляет 1%. Вероятность прилипания частицы к поверхности пыли принята равной 100%, эффективность реактивной (химической) десорбции – 1%. Энергии десорбции атомов и молекул (кроме атомарного кислорода) с поверхности пыли взяты из [18]. Энергия десорбции атомарного кислорода – из [19].

**Таблица 1.** Начальный химический состав для моделей объектов диффузной среды. Обилие рассчитывается относительно полного количества ядер водорода (H) в единице объема [20]

Атом	Обилие относительно $n_H$
H	1.0
He	$8.5 \times 10^{-2}$
N	$6.8 \times 10^{-5}$
O	$4.9 \times 10^{-4}$
C+	$2.7 \times 10^{-4}$
S+	$1.3 \times 10^{-5}$
Si+	$3.2 \times 10^{-5}$
Fe+	$3.2 \times 10^{-5}$
Na+	$1.7 \times 10^{-6}$
Mg+	$3.9 \times 10^{-5}$
Cl+	$3.2 \times 10^{-7}$
P+	$2.6 \times 10^{-7}$
F+	$3.6 \times 10^{-8}$

Начальный химический состав, представленный в табл. 1, взят из статьи [20]. Величины обилий элементов даны относительно полного количества ядер водорода в единице объема. Среда электрически нейтральна.

#### 2.4. Физические параметры моделей

Ключевыми физическими параметрами наших моделей являются полное количество атомов водорода в единице объема, отражающее плотность газовой фазы моделируемой среды, температуры газа и пыли, оптическая экстинкция, характеризующая поглощение межзвездного излучения, скорость ионизации космическими лучами и интенсивность диффузного ультрафиолетового поля излучения. В рамках данной работы мы использовали модель диффузной среды, физические параметры которой представлены в табл. 2. Выбранные температуры газа и пыли, а также плотность газа соответствуют типичным значениям для диффузной среды и взяты из работ [3, 21], а скорость ионизации космическими лучами – из работы [22].

При моделировании диффузной среды, включающей в себя клампы, были использованы данные для температуры пыли и поглощения видимого излучения как среды в целом, так и внутри самих клампов, полученные в расчетах в работе [11]. Согласно этой работе, при моделировании использовались варианты моделей с клампами размером 0.1 и 1 а.е.

В модели, представленной в работе [10], подразумевается, что вся пыль, которая в однородной модели диффузной среды равномерно пере-

**Таблица 2.** Физические параметры объектов диффузной среды, использованные при моделировании однородной по пространственному распределению пыли диффузной среды

Объект	$n$ , $\text{см}^{-3}$	$T_g$ , K	$T_d$ , K	$A_V$ , mag	$\xi$ , $\text{с}^{-1}$	$\chi_{UV}$
Однородная модель	100	100	18	0.5	$1.3 \times 10^{-16}$	1.0

Примечание.  $n$  – числовая плотность среды;  $T_g$  – температура газа;  $T_d$  – температура пыли;  $A_V$  – поглощение видимого излучения в звездных величинах;  $\xi$  – скорость ионизации;  $\chi_{UV}$  – интенсивность УФ-излучения в единицах поля Дрейна.

мешана с газом, в модели с клампами собрана в них. Таким образом, в нашей работе масса и площадь поверхности пыли одинаковы во всех трех рассматриваемых моделях – без клампов, с клампами размером 0.1 а.е. и с клампами размером 1.0 а.е. При этом мы предполагаем, что в среде с клампами происходит активное перемешивание газового вещества между клампами и межкламповым пространством.  $A_V$  диффузного облака в целом в модели с клампами становится меньше, поскольку пыль, которая собрана в клампах, меньше экранирует ультрафиолетовое излучение, чем равномерно перемешанная с газом пыль в случае однородной модели.  $A_V$  диффузного облака в модели с клампами зависит от  $A_V$  облака в однородной модели и от размера клампов. В рамках нашей работы мы использовали  $A_V = 1^m$  для однородной модели. Наконец, поскольку объем газа в межкламповой среде в  $10^6$  раз больше объема газа внутри клампов, мы пренебрегаем газовой химией в условиях, характерных для клампа. При этом, поскольку мы предполагаем, что вся пыль сосредоточена в клампах, химия на поверхности пылевых частиц рассчитывается для физических условий внутри клампов. Параметры моделей для расчета химии в диффузной среде с клампами обобщены в табл. 3. Таким образом, для расчета химической эволюции в среде с клампами, для химии в газовой фазе используются значения температуры, плотности и экстинкции для газа вне клампов, а для расчета химических процессов на поверхности пылевых частиц используются значения параметров для условий внутри клампов. Последние в табл. 3 обозначены верхним индексом “с”. Нужно также отметить, что для фото-процессов на поверхности пылевых частиц, включая фотодесорбцию, используется значение оптической экстинкции, равное сумме  $A_V$  и  $A_V^c$ .

**Таблица 3.** Физические параметры объектов диффузной среды, использованные при моделировании в случае диффузной среды с клампами

Модель с клампами	$n$ , см <sup>-3</sup>	$T_g$ , К	$T_g^c$ , К	$T_d^c$ , К	$A_V^c$ , mag	$A_V$ , mag	$\xi$ , с <sup>-1</sup>	$\chi_{UV}$
$R_c = 0.1$ а.е.	100	100	17.4	17.4	0.1	0.24	$1.30 \times 10^{-16}$	1.0
$R_c = 1.0$ а.е.	100	100	15.7	15.7	0.98	0.15	$1.30 \times 10^{-16}$	1.0

Примечание.  $n$  – плотность по полному количеству ядер водорода в среде;  $T_g$  – температура газа в пространстве между клампами;  $T_g^c$  – температура газа внутри клампов;  $T_d^c$  – температура пыли;  $A_V^c$  – поглощение излучения в видимом диапазоне для одного клампа от поверхности до его центра;  $A_V$  – среднее поглощение излучения в центре облака с клампами для случая, когда полное количество пыли на луче зрения для однородной модели соответствует  $A_V = 1.086$  для внешнего наблюдателя;  $\xi$  – скорость ионизации;  $\chi_{UV}$  – интенсивность УФ-излучения в единицах поля Дрейна.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

#### 3.1. Относительные содержания молекул

В настоящее время в диффузной среде обнаружены, как минимум, 63 молекулы (см. [3] и ссылки в ней). На рис. 1–3 отображены результаты моделирования химической эволюции для 58 из них, поскольку молекулы  $\text{PH}_3$  и  $\text{ArH}^+$  отсутствуют в используемой химической модели, а химия хлорсодержащих молекул ( $\text{HCl}$ ,  $\text{HCl}^+$  и  $\text{H}_2\text{Cl}^+$ ) в модели существенно неполна. Для улучшения читаемости рисунков выбранные молекулы были разделены на 6 групп с учетом их состава: СН-соединения (рис. 1, группа 1), азотсодержащие молекулы (рис. 1, группа 2), серосодержащие молекулы (рис. 2, группа 3), соединения фосфора, фтора и кремния (рис. 2, группа 4), сложные органические молекулы и их прекурсоры (рис. 3, группа 5) и остальные молекулы, среди которых молекулярный водород  $\text{H}_2$ , молекула  $\text{CO}$ , вода  $\text{H}_2\text{O}$ , простые ионы и углеродные цепочки без водорода (рис. 3, группа 6).

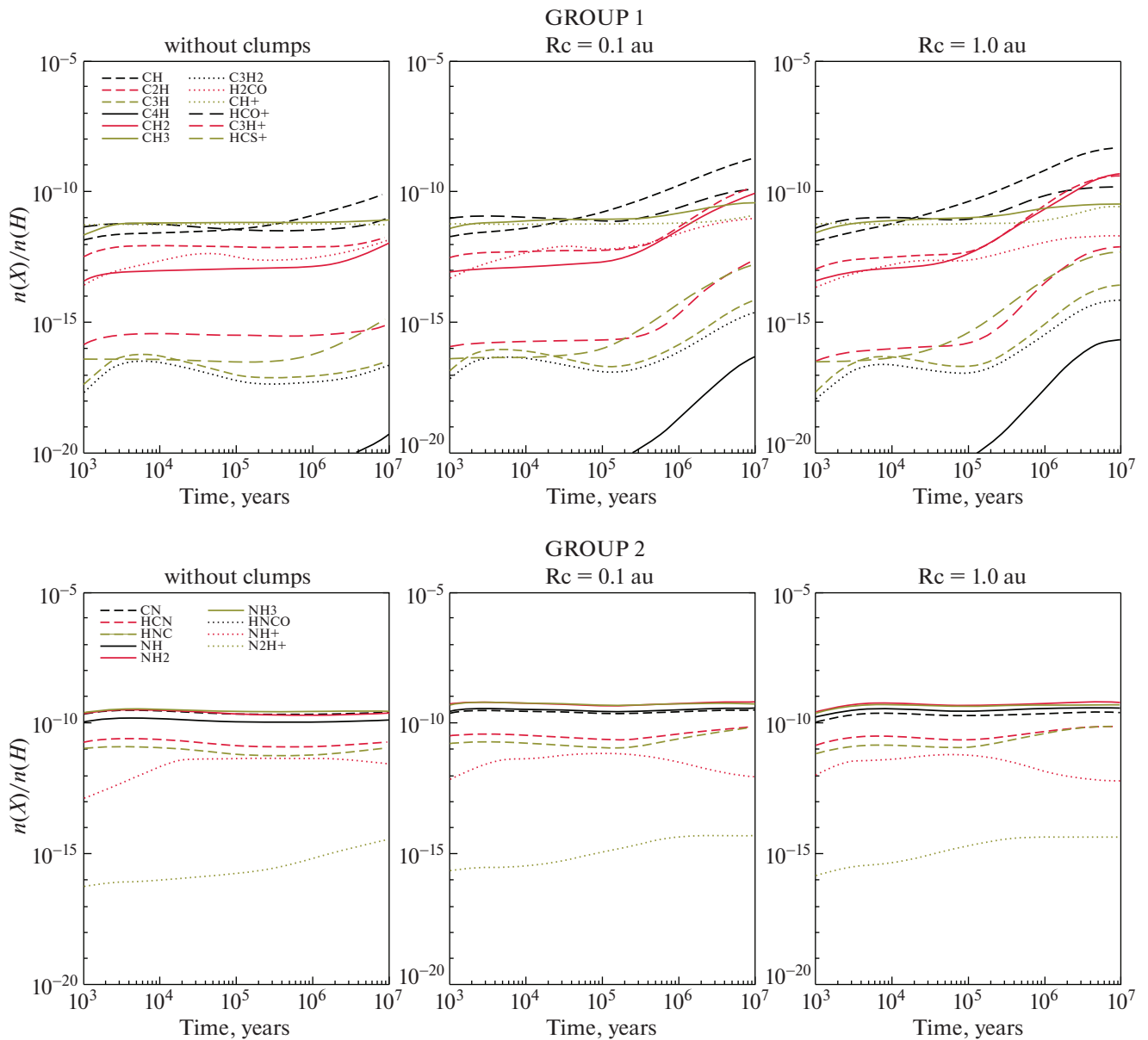
Как видно из рисунков, концентрации молекул, принадлежащих различным группам, ведут себя по-разному в моделях с клампами и без клампов. Молекулы из группы 1, простые углеродсодержащие молекулы, среди которых много соединений с углеродными цепочками, демонстрируют значительное (на 2–3 порядка) увеличение максимальных концентраций в моделях с клампами по сравнению с моделью без клампов. Более того, максимальные концентрации большинства из них несколько возрастают с увеличением размера клампов с 0.1 до 1.0 а.е. Исключение составляет формальдегид  $\text{H}_2\text{CO}$ , максимальное содержание которого в модели с крупными клампами оказывается меньше на порядок величины, чем в модели с мелкими клампами, и примерно равным содержанию в модели без клампов.

Поведение азотсодержащих молекул, составляющих группу 2, противоположно тому, которое наблюдается у молекул из группы 1. Как максимальные концентрации этих молекул, так и про-

фили их изменения со временем практически не различаются во всех трех моделях. Хотя по-прежнему можно говорить об увеличении содержания молекул в моделях с клампами по сравнению с однородной моделью, рост максимальных концентраций не превышает 2–3 раз. Такие изменения концентраций вряд ли можно считать значимыми, поскольку они меньше точности астрохимического моделирования [23], а также точности определения содержаний молекул из наблюдений.

Серосодержащие молекулы, составляющие группу 3, в целом, ведут себя аналогично азотсодержащим молекулам. Исключение составляют молекулы  $\text{HS}$ ,  $\text{NS}$  и  $\text{CS}$ , максимальные концентрации которых в моделях с клампами повышаются на 1.5–2 порядка по сравнению с моделью без клампов. Максимальные содержания остальных молекул от модели к модели изменяются в пределах порядка величины. Хочется отметить, что химия соединений серы в нашей модели не включает недавних дополнений, предложенных в работе [24]. Поэтому вывод о незначительности влияния мелкомасштабных неоднородностей пространственного распределения пыли на серосодержащие молекулы нужно воспринимать с осторожностью.

Группа 4 в основном содержит молекулы – соединения фосфора и фтора, а также окись кремния  $\text{SiO}$ . Введение клампов в химическую модель также оказывает незначительное влияние на химическую эволюцию молекул из этой группы. Как можно видеть из рис. 2, максимальные содержания всех молекул группы 4 изменяются не более, чем в 2–3 раза. Некоторым исключением из правила является молекула  $\text{PO}$ , чье минимальное содержание в моделях с клампами становится выше на порядок величины по сравнению с моделью без клампов. Интересно отметить, что полученные нами содержания молекул  $\text{PN}$ ,  $\text{PO}$ ,  $\text{CP}$  и  $\text{HCP}$  на 4–5 порядков ниже, чем в “наилучшей” (best-fit) модели химии фосфора в диффузной среде, опубликованной в работе [25]. Однако в

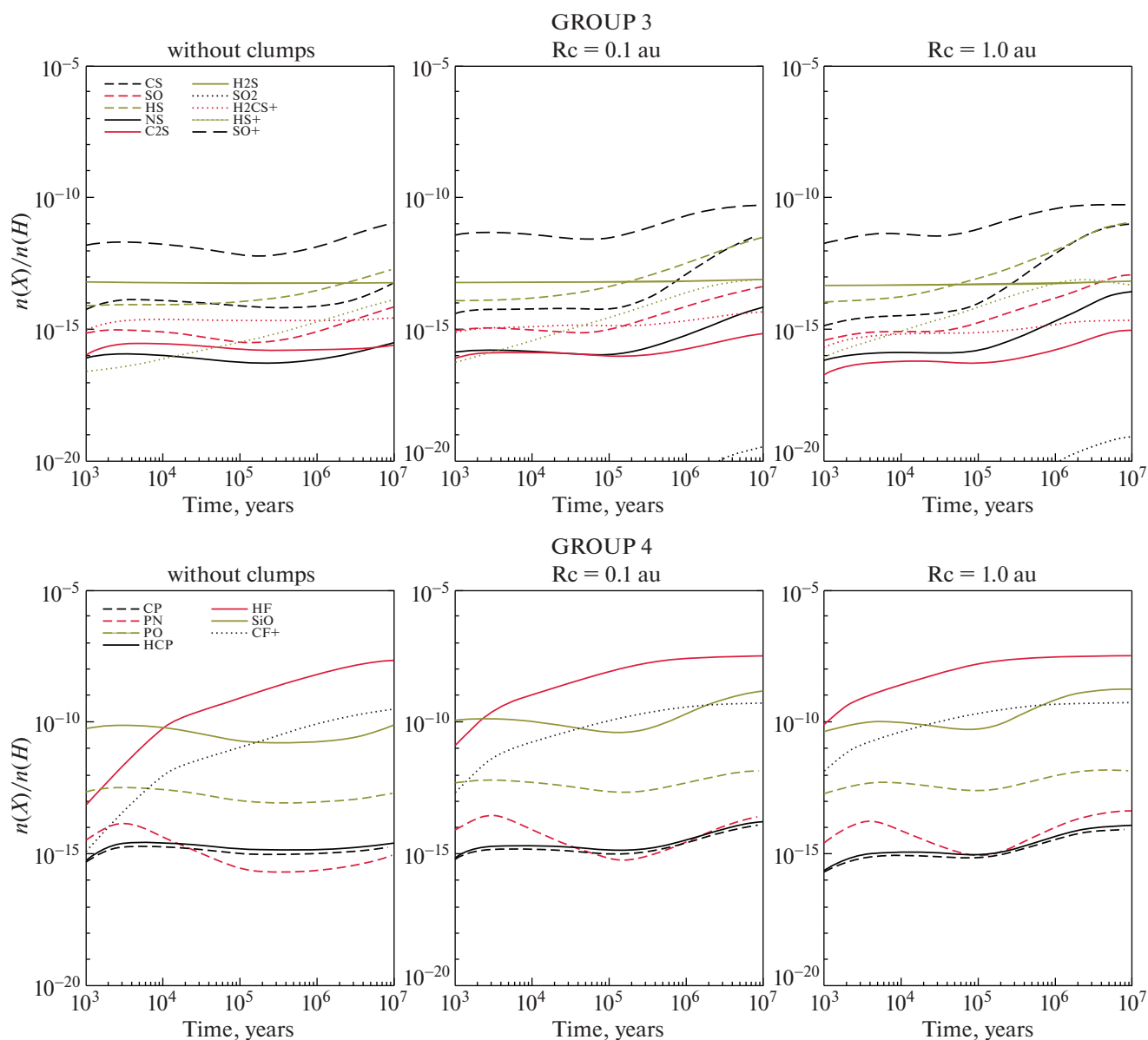


**Рис. 1.** Изменение величин относительных обилий молекул от времени для различных моделей диффузной среды: однородной (слева), с клампами радиуса 0.1 а.е. (в центре), с клампами радиуса 1.0 а.е. (справа). Время эволюции: от  $10^3$  до  $10^7$  лет. Группы молекул 1 (верхняя панель) и 2 (нижняя панель).

модели, опубликованной в упомянутой работе, относительно высокие концентрации фосфоросодержащих молекул достигаются лишь при значениях оптической экстинкции  $A_V$  равных или превышающих  $3.0^m$ . Авторы статьи [25] объясняют выбор относительно высокого значения  $A_V$ , характерного, скорее, для полупрозрачной (translucent) среды тем, что на луче зрения могут находиться области более плотной среды, в которой, по-видимому, в реальности и находятся фосфоросодержащие молекулы с высокими содержа-

ниями относительно водорода. В то же время значения содержаний фосфоросодержащих молекул, полученные в статье [25] для значений  $A_V = 1^m$  (меньше авторы не рассматривают), приближаются к модельным величинам, полученным нами.

Группа 5 содержит сложные органические молекулы и их прекурсоры — соединения, чье обнаружение в диффузной среде было, пожалуй, наиболее неожиданным. Как и для молекул из предыдущей группы, наличие/отсутствие клампов в среде не оказывает значимого влияния на их



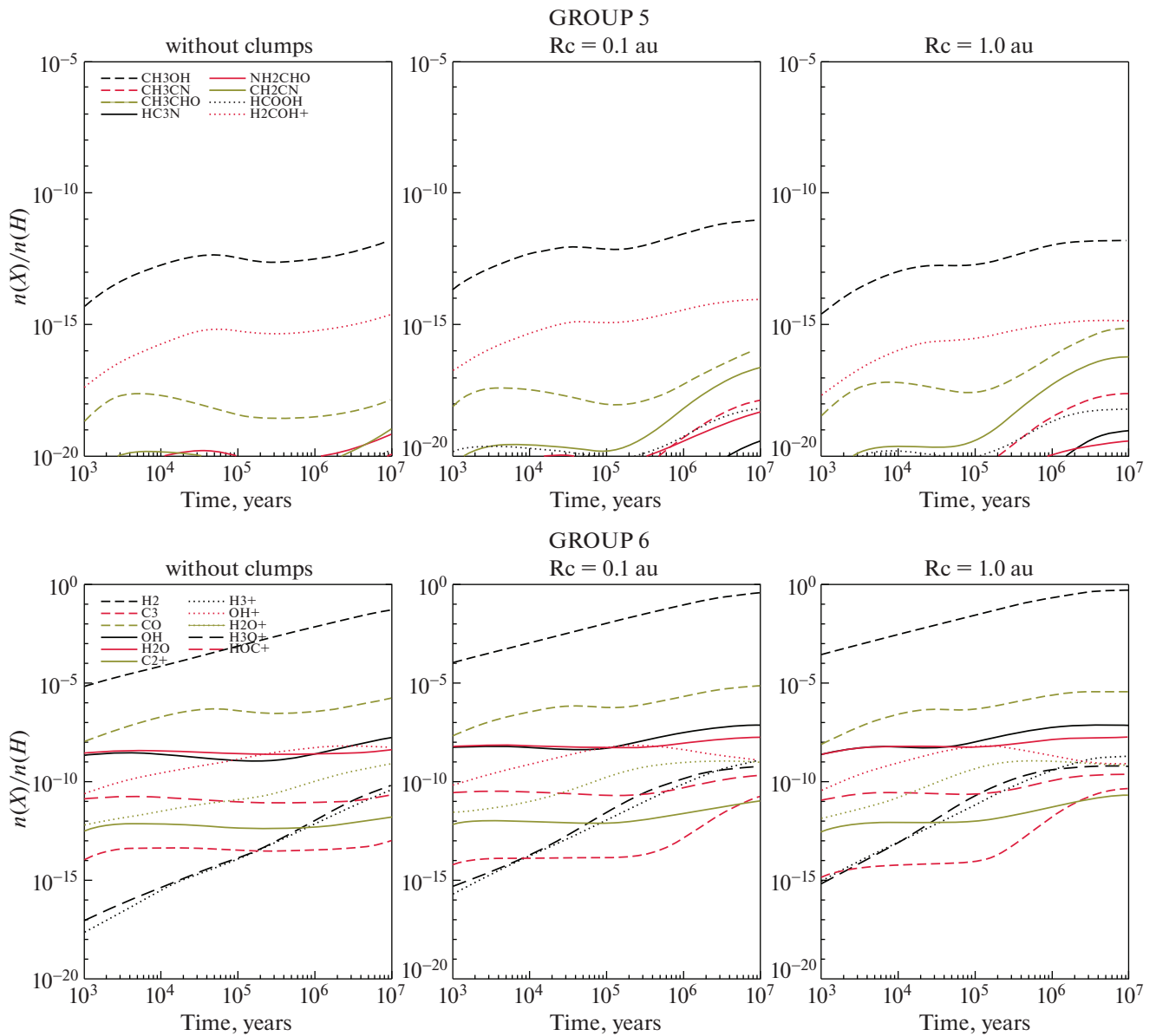
**Рис. 2.** Изменение величин относительных обилий молекул от времени для различных моделей диффузной среды: однородной (слева), с клампами радиуса 0.1 а.е. (в центре), с клампами радиуса 1.0 а.е. (справа). Время эволюции: от  $10^3$  до  $10^7$  лет. Группы молекул 3 (верхняя панель) и 4 (нижняя панель).

эволюцию. Как можно видеть из рис. 3, рассматриваемые нами в данной работе модели диффузной среды, как с клампами, так и без них, не способны объяснить наблюдаемые содержания сложных молекул за исключением метанола  $\text{CH}_3\text{OH}$ , содержание которого приближается к зафиксированному в наблюдениях диффузной среды. Невозможность воспроизведения содержаний сложных органических молекул моделью диффузной среды, по-видимому, означает, что эти молекулы все же образуются в более плотном газе полупрозрачных облаков, попадающих на

лучи зрения при наблюдениях диффузной среды. Метанол является исключением из этого правила, поскольку его образование эффективно на поверхности пылевых частиц, в том числе, и при температурах пыли, характерных для молекулярной диффузной среды.

Наконец, группа 6 включает в себя химически разнородные молекулы. Неудивительно, что их эволюция в моделях с клампами и без клампов протекает по-разному.

Стоит отметить различие темпов превращения атомарного водорода в молекулярный во всех



**Рис. 3.** Изменение величин относительных обилий молекул от времени для различных моделей диффузной среды: однородной (слева), с клампами радиуса 0.1 а.е. (в центре), с клампами радиуса 1.0 а.е. (справа). Время эволюции: от  $10^3$  до  $10^7$  лет. Группы молекул 5 (верхняя панель) и 6 (нижняя панель).

трех моделях диффузной среды. Как видно из графиков на рис. 3, в моделях с клампами время перехода водорода из атомарного в молекулярный ускоряется более, чем на порядок по сравнению с моделью, предполагающей равномерное распределение пыли. Этот факт имеет важное значение для химической эволюции других молекул, поскольку присутствие молекулярного водорода является необходимым условием для возникновения эффективной ион-молекулярной химии в газе. Кроме того, время перехода  $H \rightarrow H_2$  говорит в пользу сценария образования гигантских молеку-

лярных облаков в крупномасштабных турбулентных потоках. Подробнее этот вопрос обсуждается в работе [12].

Другие молекулы из группы 6 слабо реагируют на наличие/отсутствие клампов, изменение их содержаний не превышает порядка величины. Исключение составляет молекула  $C_3$ , максимальное содержание которой в моделях с клампами увеличивается на 3 порядка в сравнении с моделью без клампов.  $C_3$  обнаружена во множестве наблюдений диффузной среды. По-видимому, это неудивительно, т.к. относительно высокого содер-



**Таблица 4.** Значения величин обилий молекул в моделях однородной диффузной среды, диффузной среды с клапмами  $R_c = 0.1$  а.е. и диффузной среды с клапмами  $R_c = 1.0$  а.е. в сравнении с наблюдаемыми значениями молекул в диффузной среде

Молекула	Используемая модель			Наблюдения
	Однородная	$R_c = 0.1$ а.е.	$R_c = 1.0$ а.е.	
C2H	1.60E-11	2.15E-10	4.00E-10	2.90E-08
C3H	2.97E-16	1.17E-14	2.53E-14	2.00E-10
C3H2	1.55E-16	3.92E-15	7.36E-15	1.40E-09
C3	1.20E-12	2.44E-11	4.380E-11	1.10E-09
CN	3.43E-10	3.36E-10	2.72E-10	1.50E-08
HCN	2.97E-11	7.83E-11	7.66E-11	0.30E-08
<b>HNC</b>	2.16E-11	<b>7.47E-11</b>	<b>7.60E-11</b>	7.00E-10
CS	5.16E-13	5.64E-12	9.92E-12	1.42E-09
SO	1.91E-14	5.43E-14	1.15E-13	4.52E-10
H2S	6.07E-14	7.86E-14	6.45E-14	2.44E-09
<b>CH</b>	3.23E-10	<b>2.50E-09</b>	<b>4.80E-09</b>	1.96E-08
CH+	5.93E-12	1.43E-11	2.79E-11	4.18E-09
<b>NH3</b>	<b>3.54E-10</b>	<b>5.98E-10</b>	<b>5.19E-10</b>	3.00E-09
H2CO	6.40E-12	1.00E-11	2.05E-12	0.40E-08
<b>NH</b>	<b>1.60E-10</b>	<b>3.92E-10</b>	<b>4.01E-10</b>	4.95E-09
<b>OH</b>	<b>3.99E-08</b>	<b>7.00E-08</b>	<b>6.77E-08</b>	1.00E-07
<b>CO</b>	<b>7.16E-06</b>	<b>6.90E-06</b>	<b>3.45E-06</b>	5.35E-06
HCO+	3.66E-11	1.36E-10	1.50E-10	0.30E-08
CH3CN	<b>1.32E-19</b>	<b>1.83E-18</b>	<b>2.44E-18</b>	<0.40E-10
CH3OH	6.85E-12	9.27E-12	1.50E-12	8.10E-08*
N2H+	<b>5.16E-15</b>	<b>5.22E-15</b>	<b>4.57E-15</b>	<0.40E-11
HS	5.98E-13	4.33E-12	1.16E-11	4.96E-09
HS+	3.56E-14	7.64E-14	7.57E-14	1.16E-09
CH2	7.26E-12	1.32E-10	4.96E-10	1.60E-08
<b>NH2</b>	<b>3.35E-10</b>	<b>6.53E-10</b>	<b>6.48E-10</b>	4.00E-09
<b>H2O</b>	<b>8.65E-09</b>	<b>1.74E-08</b>	<b>1.65E-08</b>	2.40E-08
<b>H3O+</b>	<b>2.36E-10</b>	<b>5.60E-10</b>	<b>5.78E-10</b>	2.50E-09
<b>HF</b>	<b>2.89E-08</b>	<b>3.27E-08</b>	<b>3.31E-08</b>	1.40E-08
PN	1.45E-14	3.42E-14	4.40E-14	<4.90E-11
PO	5.86E-13	1.51E-12	1.47E-12	<5.00E-10
CP	5.71E-15	1.37E-14	8.30E-15	<2.60E-09

Примечание. \* В работе [26] отмечено, что полученные оценки относительного содержания метанола являются завышенными из-за возможно заниженной оценки лучевой концентрации молекулярного водорода. Жирным шрифтом выделены молекулы, величины которых близки к наблюдаемым. Приведены молекулы, для которых самими наблюдателями были отмечены оценки относительных обилий. Наблюдательные данные взяты из работ [4–7, 26–34].

жания этой молекулы удалось достичь уже в нашей модели однородной диффузной среды, отличающейся низкой плотностью и малым значением экстинкции  $A_\nu$ . Присутствие клапмов является при этом необходимым условием достижения молекулой  $C_3$  высокого содержания относительно водорода в диффузной среде.

В табл. 4 приведены максимальные модельные концентрации молекул, которые были обнаружены в диффузной среде. Также в правом столбце табл. 4 приведены величины концентраций молекул, полученные из наблюдений. Величины содержаний молекул в диффузной среде получают из наблюдений вдоль луча зрения, вдоль которого

**Таблица 5.** Значения величин отношений обилий в модели однородной диффузной среды для различных моментов времени в сравнении с наблюдаемыми значениями отношений в диффузной среде

Отношение	10 <sup>5</sup> лет	10 <sup>6</sup> лет	10 <sup>7</sup> лет	10 <sup>8</sup> лет	Наблюдения	Ссылка
C2H/HCO+	2.26E-001	2.36E-001	2.09E-001	4.39E-001	1.45E+001	[4]
C2H/C3H	7.70E+004	8.77E+004	5.61E+004	5.40E+004	2.00E+002	[35]
C3H2/HCO+	1.75E-006	1.59E-006	2.29E-006	4.24E-006	7.00E-001	[4]
C4H/C2H	3.21E-009	4.20E-009	2.49E-008	7.14E-008	1.00E+000	[35]
CN/HCN	<b>1.71E+001</b>	<b>1.74E+001</b>	<b>1.35E+001</b>	<b>1.02E+001</b>	6.80E+000	[5]
HCN/C2H	1.80E+001	1.69E+001	9.83E+000	1.86E+000	8.00E-002	[5]
HCN/HCO+	<b>4.05E+000</b>	<b>3.99E+000</b>	<b>2.05E+000</b>	<b>8.14E-001</b>	1.97E+000	[5]
HCN/HNC	<b>2.11E+000</b>	<b>2.06E+000</b>	<b>1.71E+000</b>	<b>1.38E+000</b>	5.00E+000	[35]
HC3N/HCN	5.30E-011	5.17E-011	6.38E-011	1.46E-010	4.00E-001	[35]
C2H3N/HC3N	1.96E-001	3.79E-001	<b>9.64E+000</b>	<b>3.03E+001</b>	4.00E+000	[35]
CS/HCO+	2.09E-003	2.27E-003	5.78E-003	1.41E-002	2.00E+000	[6]
CS/HCN	5.16E-004	5.69E-004	2.81E-003	1.73E-002	7.00E-001	[6]
CS/H2S	1.32E-001	1.39E-001	<b>9.52E-001</b>	<b>7.91E+000</b>	6.00E+000	[6]
CS/SO	2.14E+001	<b>9.17E+000</b>	<b>8.32E+000</b>	2.70E+001	1.70E+000	[6]
CS/HCS+	2.37E+002	<b>1.28E+002</b>	<b>3.53E+001</b>	<b>3.55E+001</b>	1.33E+001	[6]
CS/C2H	9.27E-003	9.62E-003	<b>2.77E-002</b>	<b>3.22E-002</b>	1.30E-001	[6]
SO/HCO+	9.78E-005	2.48E-004	6.94E-004	5.24E-004	9.00E-001	[6]
SO/H2S	6.19E-003	1.52E-002	<b>1.14E-001</b>	<b>2.93E-001</b>	2.40E-001	[7]
SO2/HCO+	1.80E-011	5.01E-011	2.98E-010	4.19E-010	5.00E-001	[6]
H2S/HCO+	1.58E-002	1.63E-002	6.07E-003	1.79E-003	2.70E-001	[6]
HCS+/HCO+	8.81E-006	1.77E-005	1.64E-004	3.97E-004	1.30E-001	[6]
OH/CH	2.86E+002	1.87E+002	1.85E+002	1.24E+002	3.00E+000	[35]
NH3/CS	3.99E+004	3.74E+004	5.49E+003	6.39E+002	1.00E+000	[28]
NH3/H2CO	9.13E+002	9.52E+002	2.18E+002	5.15E+001	4.00E-001	[28]
H2CO/CS	4.38E+001	3.93E+001	2.52E+001	<b>1.24E+001</b>	2.30E+000	[28]
H2O	9.13E+002	9.89E+001	<b>1.22E+001</b>	<b>4.35E+000</b>	1.50E+000	[8]
OH+/H2O+	1.12E+002	4.96E+001	<b>7.15E+000</b>	<b>2.90E+000</b>	4.00E+000	[8]
OH+/H3O+	1.02E+005	4.90E+003	8.76E+001	<b>1.26E+001</b>	6.00E+000	[8]
HS/H2S	<b>2.06E-001</b>	<b>5.55E-001</b>	<b>3.20E+000</b>	<b>9.16E+000</b>	1.25E+000	[7]
HS+/CH	5.60E-005	3.29E-004	2.29E-003	6.01E-003	2.80E-001	[9]
НОС+/HCO+	2.65E+000	2.62E+000	2.13E+000	1.79E+000	1.50E-002	[36]
HCO+/HF	4.15E-003	5.00E-004	4.34E-004	1.26E-003	2.50E-001	[36]
НОС+/HF	<b>1.10E-002</b>	<b>1.31E-003</b>	<b>9.26E-004</b>	<b>2.26E-003</b>	4.00E-003	[36]
CF+/HF	<b>1.32E-002</b>	<b>1.28E-002</b>	<b>1.41E-002</b>	<b>1.51E-002</b>	1.70E-002	[36]

Примечание. Жирным шрифтом выделены отношения, величины которых близки к наблюдаемым.

может находиться множество областей, не связанных друг с другом эволюционно. В этой ситуации нам представляется бессмысленным определять “время наилучшего согласия” между моделью и наблюдениями, как это часто делается при моделировании отдельных объектов в областях звездообразования. По этой причине с данными наблюдений мы сравниваем не набор концентраций молекул, рассчитанный для одного

момента времени “наилучшего согласия”, а максимальные значения модельных концентраций, хотя они и достигаются в разные моменты времени.

Как можно видеть из табл. 4, из 28 молекул, наблюдательные данные о содержании которых в диффузной среде нам удалось обобщить, модель без клампов воспроизводит в пределах порядка величины 10 молекул, а обе модели с клампами –

**Таблица 6.** Значения величин отношений обилий в модели диффузной среды с клампами радиуса  $R_c = 0.1$  а.е. для различных моментов времени в сравнении с наблюдаемыми значениями отношений в диффузной среде

Отношение	$10^5$ лет	$10^6$ лет	$10^7$ лет	$10^8$ лет	Наблюдения	Ссылка
<b>C2H/HCO+</b>	7.67E-002	1.74E-001	1.19E+000	<b>1.58E+000</b>	1.45E+001	[4]
C2H/C3H	2.64E+004	3.21E+004	2.10E+004	1.83E+004	2.00E+002	[35]
C3H2/HCO+	1.75E-006	2.93E-006	1.99E-005	2.87E-005	7.00E-001	[4]
C4H/C2H	8.00E-009	4.61E-008	3.31E-007	4.35E-007	1.00E+000	[35]
<b>CN/HCN</b>	<b>1.02E+001</b>	<b>7.43E+000</b>	<b>4.58E+000</b>	<b>4.37E+000</b>	6.80E+000	[5]
<b>HCN/C2H</b>	4.30E+001	9.23E+000	<b>5.01E-001</b>	<b>3.64E-001</b>	8.00E-002	[5]
<b>HCN/HCO+</b>	<b>3.30E+000</b>	<b>1.61E+000</b>	<b>5.96E-001</b>	<b>5.75E-001</b>	1.97E+000	[5]
<b>HCN/HNC</b>	<b>2.06E+000</b>	<b>1.52E+000</b>	<b>1.07E+000</b>	<b>1.05E+000</b>	5.00E+000	[35]
HC3N/HCN	1.74E-011	3.14E-011	5.15E-010	7.58E-010	4.00E-001	[35]
<b>C2H3N/HC3N</b>	<b>1.43E+000</b>	4.19E+001	<b>3.63E+001</b>	<b>3.09E+001</b>	4.00E+000	[35]
CS/HCO+	7.85E-004	4.89E-003	3.12E-002	4.14E-002	2.00E+000	[6]
CS/HCN	2.38E-004	3.04E-003	5.23E-002	<b>7.21E-002</b>	7.00E-001	[6]
CS/H2S	9.62E-002	<b>1.80E+000</b>	<b>5.00E+001</b>	7.18E+001	6.00E+000	[6]
CS/SO	<b>6.02E+000</b>	<b>1.61E+001</b>	9.38E+001	1.04E+002	1.70E+000	[6]
CS/HCS+	<b>5.84E+001</b>	<b>2.28E+001</b>	<b>2.41E+001</b>	<b>2.42E+001</b>	1.33E+001	[6]
CS/C2H	1.02E-002	<b>2.80E-002</b>	<b>2.62E-002</b>	<b>2.62E-002</b>	1.30E-001	[6]
SO/HCO+	1.31E-004	3.03E-004	3.33E-004	3.98E-004	9.00E-001	[6]
SO/H2S	1.60E-002	<b>1.11E-001</b>	<b>5.33E-001</b>	<b>6.91E-001</b>	2.40E-001	[7]
SO2/HCO+	2.16E-011	1.28E-010	2.84E-010	3.49E-010	5.00E-001	[6]
H2S/HCO+	8.16E-003	2.72E-003	6.24E-004	5.77E-004	2.70E-001	[6]
HCS+/HCO+	1.34E-005	2.14E-004	1.29E-003	1.71E-003	1.30E-001	[6]
<b>OH/CH</b>	2.80E+002	1.61E+002	3.72E+001	<b>2.79E+001</b>	3.00E+000	[35]
NH3/CS	8.91E+004	4.73E+003	1.54E+002	1.05E+002	1.00E+000	[28]
NH3/H2CO	8.24E+002	2.32E+002	6.38E+001	5.91E+001	4.00E-001	[28]
<b>H2CO/CS</b>	1.08E+002	<b>2.04E+001</b>	<b>2.41E+000</b>	<b>1.77E+000</b>	2.30E+000	[28]
<b>H2O</b>	6.38E+001	<b>6.74E+000</b>	<b>1.53E+000</b>	<b>1.35E+000</b>	1.50E+000	[8]
<b>OH+/H2O+</b>	<b>3.15E+001</b>	<b>4.17E+000</b>	<b>1.38E+000</b>	<b>1.28E+000</b>	4.00E+000	[8]
<b>OH+/H3O+</b>	2.01E+003	<b>2.81E+001</b>	<b>2.11E+000</b>	<b>1.72E+000</b>	6.00E+000	[8]
<b>HS/H2S</b>	<b>6.88E-001</b>	<b>4.83E+000</b>	3.91E+001	5.51E+001	1.25E+000	[7]
HS+/CH	4.72E-004	3.81E-003	6.62E-003	5.33E-003	2.80E-001	[9]
НОС+/HCO+	2.61E+000	2.02E+000	1.56E+000	1.54E+000	1.50E-002	[36]
HCO+/HF	8.86E-004	9.25E-004	3.80E-003	4.17E-003	2.50E-001	[36]
<b>НОС+/HF</b>	<b>2.31E-003</b>	<b>1.87E-003</b>	<b>5.94E-003</b>	<b>6.40E-003</b>	4.00E-003	[36]
<b>CF+/HF</b>	<b>1.34E-002</b>	<b>1.47E-002</b>	<b>1.61E-002</b>	<b>1.62E-002</b>	1.70E-002	[36]

Примечание. Жирным шрифтом выделены отношения, величины которых близки к наблюдаемым.

по 12 молекул. Согласие между моделями и данными наблюдений далеко от полного, и введение в модель клампов улучшает его лишь незначительно. Максимальные содержания большинства молекул в нашей модели, характеризующейся низкой плотностью газа и малыми значениями оптической экстинкции меньше величин, полученных из наблюдений, на несколько порядков величины.

### 3.2. Отношения содержаний молекул

Отношения обилий молекул зачастую определяются из наблюдений точнее, чем относительные содержания молекул. Поэтому для более полного понимания того, как и насколько сильно клампы влияют на химическую эволюцию среды, мы также проанализировали влияние клампов на эти отношения. На основании полученных результатов моделирования для всех трех моделей

**Таблица 7.** Значения величин отношений обилий в модели диффузной среды с клампами радиуса  $R_c = 1.0$  а.е. для различных моментов времени в сравнении с наблюдаемыми значениями отношений в диффузной среде

Отношение	$10^5$ лет	$10^6$ лет	$10^7$ лет	$10^8$ лет	Наблюдения	Ссылка
<b>C2H/HCO+</b>	5.62E-002	4.28E-001	<b>2.63E+000</b>	<b>2.67E+000</b>	1.45E+001	[4]
C2H/C3H	2.51E+004	3.75E+004	1.59E+004	1.58E+004	2.00E+002	[35]
C3H2/HCO+	1.26E-006	4.64E-006	4.81E-005	4.91E-005	7.00E-001	[4]
C4H/C2H	1.43E-008	8.66E-008	5.29E-007	5.34E-007	1.00E+000	[35]
<b>CN/HCN</b>	<b>8.30E+000</b>	<b>4.91E+000</b>	<b>3.55E+000</b>	<b>3.55E+000</b>	6.80E+000	[5]
<b>HCN/C2H</b>	4.81E+001	1.70E+000	<b>1.94E-001</b>	<b>1.91E-001</b>	8.00E-002	[5]
<b>HCN/HCO+</b>	<b>2.70E+000</b>	<b>7.27E-001</b>	<b>5.11E-001</b>	<b>5.11E-001</b>	1.97E+000	[5]
<b>HCN/HNC</b>	<b>1.95E+000</b>	<b>1.21E+000</b>	<b>1.01E+000</b>	<b>1.01E+000</b>	5.00E+000	[35]
HC3N/HCN	8.11E-012	8.63E-011	1.20E-009	1.22E-009	4.00E-001	[35]
<b>C2H3N/HC3N</b>	<b>1.29E+001</b>	7.14E+001	<b>2.63E+001</b>	<b>2.61E+001</b>	4.00E+000	[35]
CS/HCO+	1.03E-003	1.10E-002	6.51E-002	6.62E-002	2.00E+000	[6]
CS/HCN	3.81E-004	1.52E-002	<b>1.28E-001</b>	<b>1.30E-001</b>	7.00E-001	[6]
CS/H2S	1.89E-001	<b>1.35E+001</b>	1.51E+002	1.54E+002	6.00E+000	[6]
<b>CS/SO</b>	<b>5.07E+000</b>	4.82E+001	8.71E+001	8.63E+001	1.70E+000	[6]
<b>CS/HCS+</b>	<b>2.31E+001</b>	<b>1.98E+001</b>	<b>2.05E+001</b>	<b>2.05E+001</b>	1.33E+001	[6]
<b>CS/C2H</b>	<b>1.83E-002</b>	<b>2.58E-002</b>	<b>2.48E-002</b>	<b>2.48E-002</b>	1.30E-001	[6]
SO/HCO+	2.03E-004	2.29E-004	7.48E-004	7.67E-004	9.00E-001	[6]
<b>SO/H2S</b>	<b>3.72E-002</b>	<b>2.79E-001</b>	<b>1.73E+000</b>	<b>1.78E+000</b>	2.40E-001	[7]
SO2/HCO+	3.90E-011	1.35E-010	5.54E-010	5.68E-010	5.00E-001	[6]
H2S/HCO+	5.45E-003	8.19E-004	4.31E-004	4.31E-004	2.70E-001	[6]
HCS+/HCO+	4.45E-005	5.56E-004	3.18E-003	3.23E-003	1.30E-001	[6]
<b>OH/CH</b>	2.39E+002	8.19E+001	<b>1.43E+001</b>	<b>1.41E+001</b>	3.00E+000	[35]
NH3/CS	5.12E+004	6.81E+002	5.33E+001	5.23E+001	1.00E+000	[28]
NH3/H2CO	2.03E+003	4.48E+002	2.54E+002	2.53E+002	4.00E-001	[28]
<b>H2CO/CS</b>	2.52E+001	<b>1.52E+000</b>	2.10E-001	2.07E-001	2.30E+000	[28]
<b>H2O</b>	2.37E+001	<b>2.66E+000</b>	<b>1.09E+000</b>	<b>1.09E+000</b>	1.50E+000	[8]
<b>OH+/H2O+</b>	<b>1.30E+001</b>	<b>1.98E+000</b>	<b>1.14E+000</b>	<b>1.14E+000</b>	4.00E+000	[8]
<b>OH+/H3O+</b>	3.08E+002	<b>5.27E+000</b>	<b>1.25E+000</b>	<b>1.24E+000</b>	6.00E+000	[8]
<b>HS/H2S</b>	<b>1.77E+000</b>	1.77E+001	1.75E+002	1.80E+002	1.25E+000	[7]
HS+/CH	1.17E-003	6.92E-003	1.78E-003	1.72E-003	2.80E-001	[9]
НОС+/HCO+	2.47E+000	1.69E+000	1.49E+000	1.49E+000	1.50E-002	[36]
HCO+/HF	5.69E-004	2.21E-003	4.53E-003	4.53E-003	2.50E-001	[36]
<b>НОС+/HF</b>	<b>1.41E-003</b>	<b>3.75E-003</b>	<b>6.74E-003</b>	<b>6.75E-003</b>	4.00E-003	[36]
<b>CF+/HF</b>	<b>1.37E-002</b>	<b>1.57E-002</b>	<b>1.64E-002</b>	<b>1.64E-002</b>	1.70E-002	[36]

Примечание. Жирным шрифтом выделены отношения, величины которых близки к наблюдаемым.

были составлены табл. 5, 6 и 7 со значениями отношений молекул, которые наблюдались в диффузной среде в направлении на различные источники, и построены их графики как функции времени (рис. 4, 5 и 6). Все отношения разбиты на 5 групп случайным образом. В литературе о наблюдениях молекулярного состава диффузной среды представлены наблюдаемые значения от-

ношений некоторых молекул, которые приведены в 6 и 7 столбцах табл. 5–7.

Во всех рассматриваемых нами моделях есть отношения обилий молекул, чьи величины сильно отличаются от наблюдаемых: например, отношения  $C_4H/C_2H$ ,  $HC_3N/HCN$  и  $SO_2/HCO^+$ , где различия могут достигать 10 порядков по величине. Это может быть связано с тем, что в нашем

случае для моделирования выбраны типичные физические параметры диффузной среды, основанные на многих наблюдениях, а сравнение при этом идет с реальными объектами, условия в которых могут отличаться от выбранных.

Как видно из полученных нами результатов, при использовании модели с клампами и при увеличении радиуса этих клампов сходимость модельных величин отношений обилий и наблюдаемых величин становится лучше. Согласно данным, представленным в табл. 5–7, в однородной модели отношений, чьи величины согласуются с данными наблюдений, было 16, в моделях с клампами различных радиусов их стало 20: в модели с клампами удалось дополнительно объяснить такие отношения, как  $C_2H/HCO^+$ ,  $HNC/C_2H$ ,  $CS/HCN$  и  $OH/CH$  (см. табл. 6 и 7).

В случае отношений  $C_2H_3N/H_3N$ ,  $CS/HCS^+$ ,  $CS/C_2H$ ,  $SO/H_2S$ ,  $H_2O^+/H_3O^+$ ,  $OH^+/H_2O^+$  и  $HS/H_2S$  с увеличением радиуса клампа все лучше удается объяснить наблюдаемые величины отношений: величины всех этих отношений начинают лучше сходиться на временах  $10^5$ – $10^6$  лет и  $10^6$ – $10^8$  лет в случае отношения  $HS/H_2S$ , чего не было в однородной модели (см. табл. 7).

Стоит отметить, что в моделях с клампами есть случаи, когда сходимость результатов моделирования с наблюдаемыми величинами оказалась несколько хуже, чем в однородной модели. В случае отношения  $HS/H_2S$  в однородной модели величина этого отношения обилий в ней одинаково хорошо сходится с наблюдаемыми величинами и объясняет их на всем времени эволюции диффузной среды (1.25 – значение в наблюдениях и 3.20 – в однородной модели, см. табл. 5), в то время как в модели с клампами с  $R_c = 0.1$  и  $1.0$  а.е. это отношение объясняется только в моменты времени в  $10^5$  и  $10^6$  лет (см. табл. 6 и 7). Величины отношений  $CS/H_2S$  и  $CS/SO$  в однородной модели сходились с наблюдаемыми (6.0 и 1.7 соответственно) на временах порядка  $10^6$ – $10^8$  лет, тогда как в модели с  $10^7$  а.е. только в моменты  $10^6$  и  $10^5$  лет соответственно (см. табл. 7). Такое расхождение с наблюдениями может быть связано с недостаточно полными данными о химии серосодержащих соединений [24].

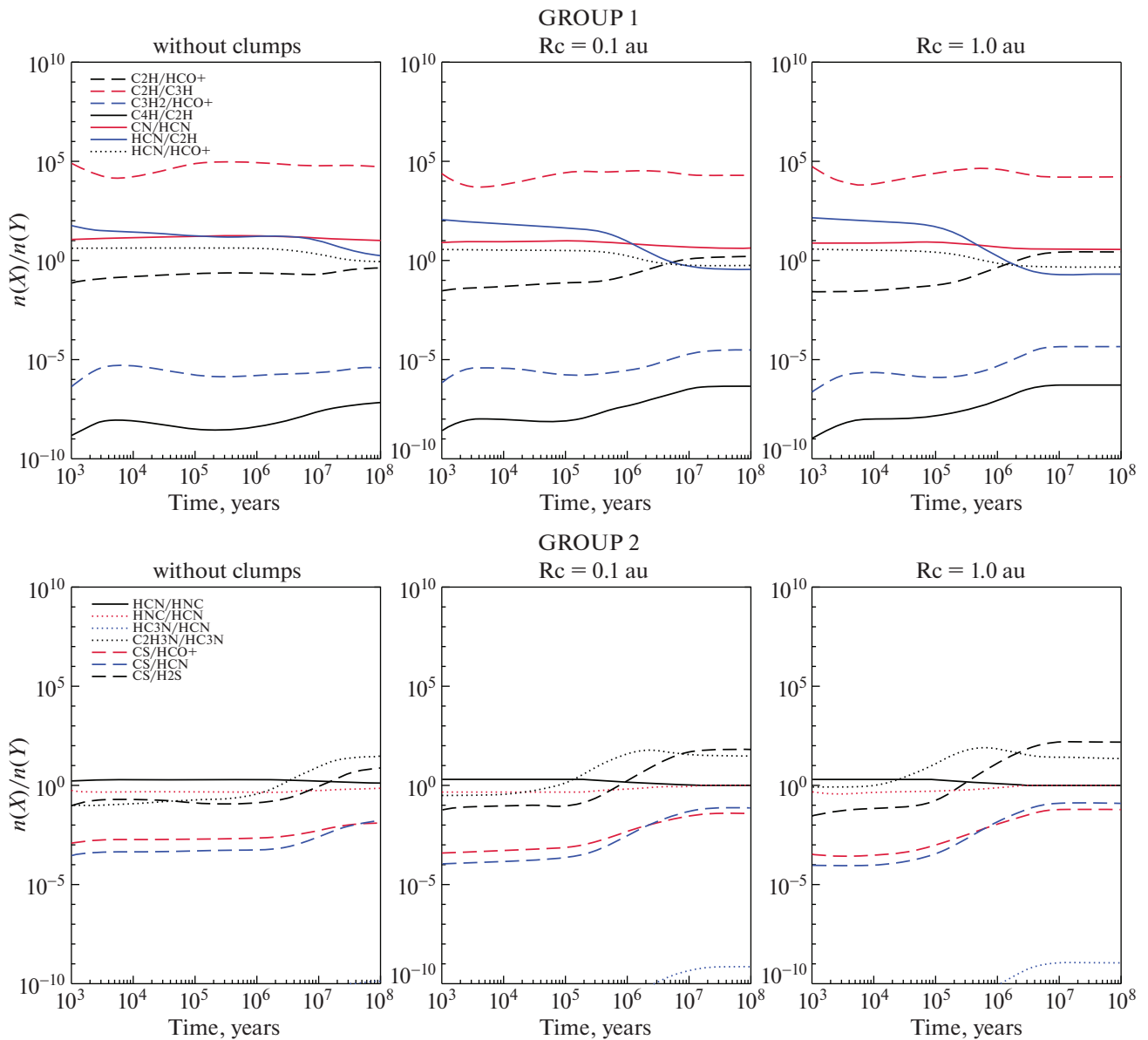
В модели однородной диффузной среды многие отношения обилий быстро выходят на стационарные значения: например,  $CN/HCN$ ,  $C_3H_2/HCO^+$ ,  $HNC/HCN$  и  $CS/HCO^+$  на рис. 4,  $SO/HCO^+$ ,  $HCS^+/HCO^+$  и  $SO/H_2S$  на рис. 5 и  $HS^+/CH^+$  на рис. 6. По сравнению с однородной моделью диффузной среды, в модели с клампами величины выбранных отношений не только изменяются в большую или меньшую стороны, но

также показывают заметное изменение с течением времени. Такое поведение отношений обилий молекул в неоднородной модели позволяет применять метод химических часов более широко и эффективно.

В целом можно сказать, что использование при моделировании неоднородной модели диффузной среды не оказывает негативного влияния на химическую эволюцию среды с точки зрения согласия с наблюдениями, а в некоторых случаях даже помогает добиться лучшей согласованности модельных и наблюдаемых значений.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

В данной работе мы рассматриваем модель диффузной фазы межзвездной среды, характеризующейся малой плотностью газа ( $n_H = 100 \text{ см}^{-3}$ ) и, что очень важно для химической эволюции, малыми значениями оптической экстинкции  $A_V$ . Поскольку типичным значением  $A_V$  для диффузного газа на луче зрения является  $A_V = 1^m$ , в нашей химической модели мы рассматриваем половинное значение,  $A_V = 0.5^m$ , т.к. предполагается, что область диффузной среды освещена ультрафиолетом со всех сторон. При выбранных нами физических условиях гомогенная химическая модель ожидаемо выдает значения содержаний многих молекул на много порядков величины меньше, чем были зафиксированы в наблюдениях. Основной целью данной работы было выяснить, может ли присутствие компактных газопылевых сгустков в диффузной среде, существование которых предсказывается в работе [10], привести к существенному увеличению максимальных содержаний молекул, чьи наблюдаемые содержания не объясняются гомогенной моделью диффузной среды. Описанные выше результаты дают, в целом, отрицательный ответ на этот вопрос. Действительно, компактные газопылевые сгустки (“кляксы”) оказывают влияние на содержания ряда молекул и молекулярных ионов, наблюдающихся в диффузной межзвездной среде, и максимальные содержания ряда молекул в моделях с клампами возрастают на 2–3 порядка величины по сравнению с моделью, в которой пыль и газ перемешаны равномерно. Тем не менее, как видно из табл. 4, даже выросшие на несколько порядков максимальные содержания молекул оказываются все еще ниже наблюдаемых, зачастую, на несколько порядков величины. Кроме того, имеется значительное число молекул, поведение содержаний которых практически одинаково в рассмотренных моделях с клампами и без клампов. Однако все же имеются две молекулы, чьи содержания в моделях с клампами приблизились к наблюдаемым величинам:  $HNC$  и  $CH$ . Также в



**Рис. 4.** Модельные отношения молекул как функции времени для различных моделей диффузной среды: однородной (слева), с клампами радиуса 0.1 а.е. (в центре), с клампами радиуса 1.0 а.е. (справа). Время эволюции: от  $10^3$  до  $10^8$  лет. Группы отношений 1 (верхняя панель) и 2 (нижняя панель).

моделях с клампами содержание молекулы  $C_3$ , обнаруженной во множестве исследований диффузной среды (что говорит о ее распространенности) вплотную приблизилось к критерию согласия с наблюдениями. Ниже мы рассматриваем особенности химической эволюции некоторых репрезентативных молекул, на примере которых можно увидеть влияние гипотезы о клампах на эволюцию молекулярного состава диффузной межзвездной среды.

В группу 1, описанную выше (верхний ряд на рис. 1), входят простые углеродосодержащие мо-

лекулы, формирующиеся в газе в ион-молекулярных химических реакциях. Содержания этих молекул растут в моделях с клампами на поздних временах эволюции, поскольку содержания этих молекул непосредственно зависят от количества молекулярного водорода ( $H_2$ ) в газе. Поскольку в моделях с клампами переход  $H \rightarrow H_2$  происходит приблизительно на порядок быстрее, на поздних временах эволюции в моделях с клампами водород находится преимущественно в молекулярной форме, а в гомогенной модели — в атомарной форме. Важность молекулярного водорода для

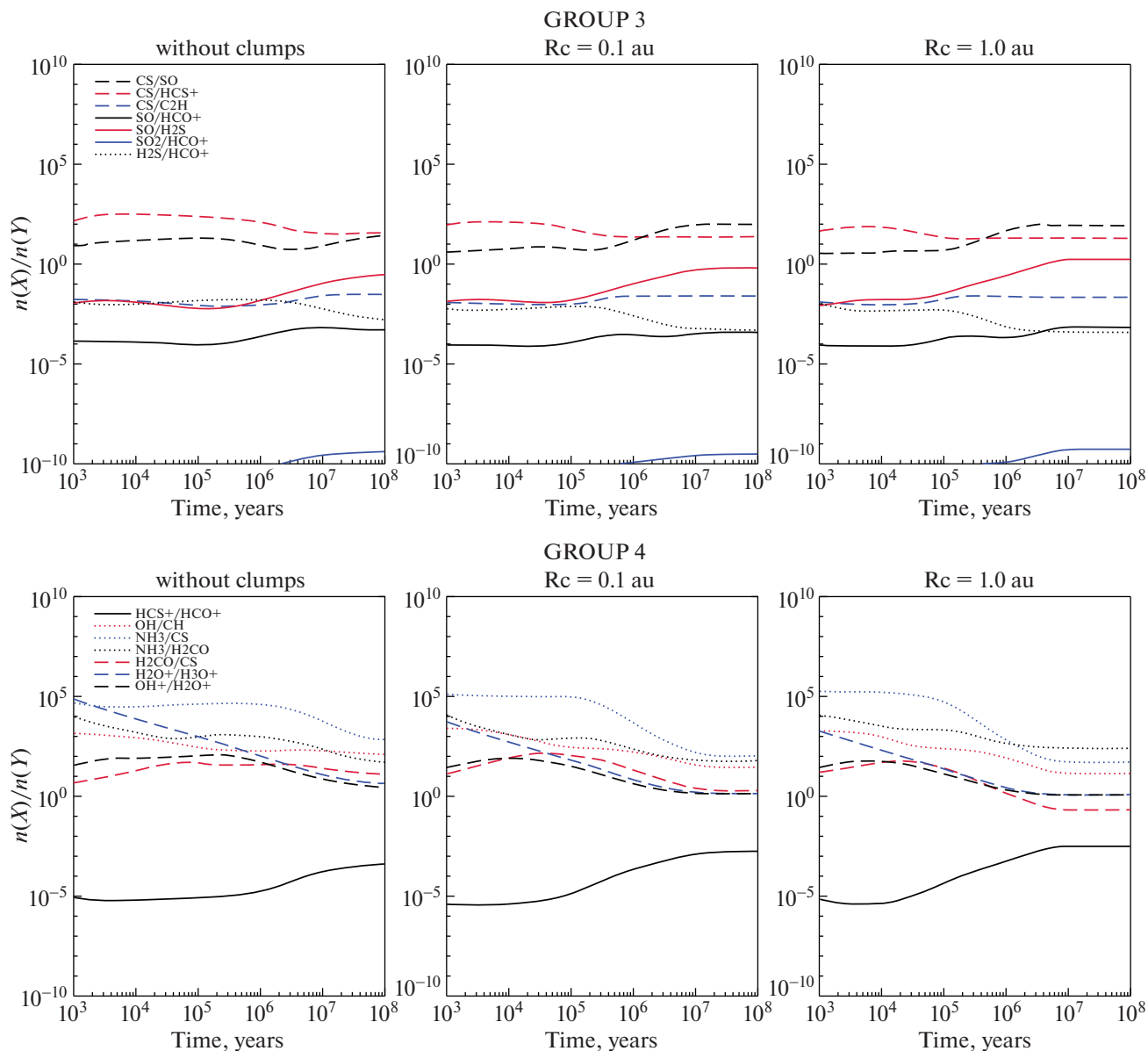
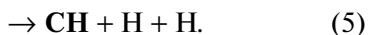
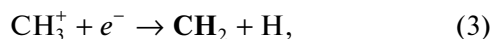
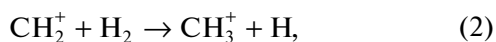
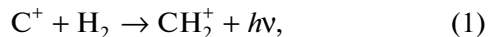
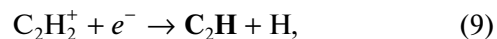
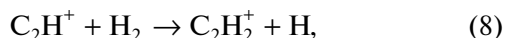
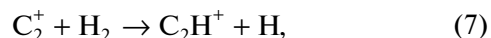


Рис. 5. Модельные отношения молекул как функции времени для различных моделей диффузной среды: однородной (слева), с клампами радиуса 0.1 а.е. (в центре), с клампами радиуса 1.0 а.е. (справа). Время эволюции: от  $10^3$  до  $10^8$  лет. Группы отношений 3 (верхняя панель) и 4 (нижняя панель).

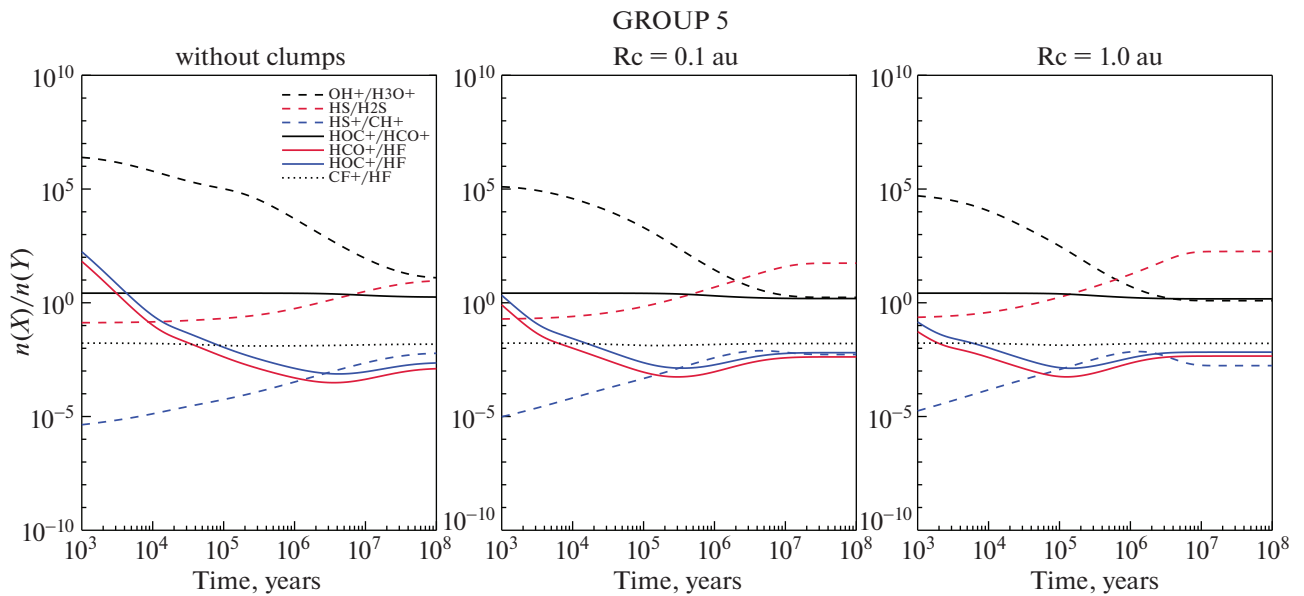
формирования простых молекул из группы 1 можно проиллюстрировать на примере следующей цепочки реакций (см., напр., [21]) (жирным шрифтом выделены молекулы из группы 1):



И, далее

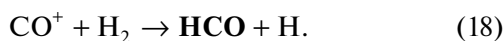
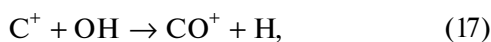
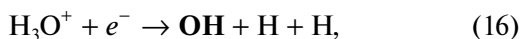
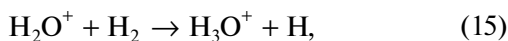
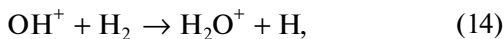
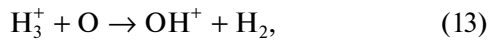
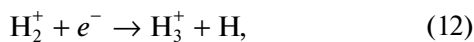
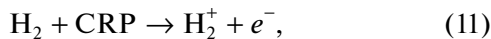


Кислородосодержащие молекулы формируются в аналогичных цепочках реакций, инициатором в

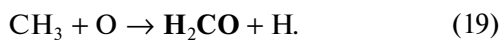


**Рис. 6.** Модельные отношения молекул как функции времени для различных моделей диффузной среды: однородной (слева), с клампами радиуса 0.1 а.е. (в центре), с клампами радиуса 1.0 а.е. (справа). Время эволюции: от  $10^3$  до  $10^8$  лет. Группа отношений 5.

которых выступает высокоактивный ион  $\text{H}_3^+$ , также образующийся из молекулярного водорода в результате взаимодействия с космическими лучами:



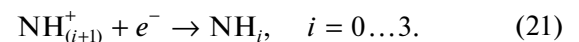
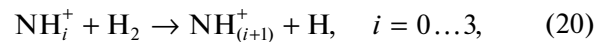
Наконец, сложные молекулы образуются из более простых. Например,



Мы полагаем, что приведенные выше примеры достаточно иллюстрируют важность молекулы  $\text{H}_2$  для химии простых соединений, и не приводим аналогичные цепочки реакций для других молекул из соображений краткости изложения материала.

В группу 2 (нижний ряд на рис. 1) входят простые азотосодержащие молекулы. В отличие от молекул из группы 1 содержания рассмотренных азотосодержащих молекул практически не реаги-

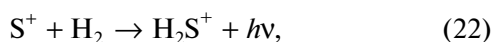
руют на введение газопылевых клампов в модель. Это связано с особенностями химии этих молекул. В частности, молекулы  $\text{NH}^+$ ,  $\text{NH}$ ,  $\text{NH}_2$  и  $\text{NH}_3$  производятся в одной последовательности ион-молекулярных реакций и реакций диссоциативной рекомбинации:



При этом первый ион в цепи,  $\text{N}^+$ , производится путем ионизации космическими лучами изначально присутствующего в модели атомарного азота  $\text{N}$ . Скорость этого процесса в нашей модели не зависит от наличия или отсутствия компактных газопылевых сгустков, что и объясняет неизменность содержаний перечисленных выше молекул в моделях с клампами и без клампов. Скорости этих реакций ограничены содержанием ионов азота, а не содержанием молекулярного водорода. Подобные рассуждения справедливы и для других молекул группы 2. Кроме того, в случае молекулы  $\text{CN}$  при объяснении стабильности ее содержания во всех трех моделях необходимо учитывать возросшую скорость ее фотодиссоциации за счет увеличения прозрачности среды при образовании клампов. Возрастающая скорость разрушения молекулы в данном случае компенсирует возрастающую скорость ее образования в реакциях между атомарным азотом и молекулами  $\text{C}_2$  и  $\text{CN}$ .



Группа 3 содержит серосодержащие молекулы. В моделях с клампами по сравнению с однородной моделью существенно растут содержания четырех молекул: HS, CS, NS и SO. Содержания этих молекул возрастают в моделях с клампами также из-за повышенной доли молекулярного водорода в газе на поздних временах эволюции в сравнении с однородной моделью:



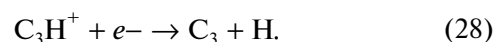
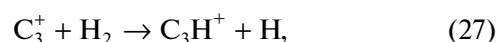
Молекула CS образуется при диссоциативной рекомбинации иона  $HCS^+$ , также образующегося в ион-молекулярных реакциях с участием молекулярного водорода. Интересно, что хотя содержания молекул CS и HS достигают в моделях с клампами значений порядка  $10^{-11}$  относительно водорода, наблюдательные данные по этим молекулам объяснить по-прежнему не удастся, т.к. концентрации, полученные из наблюдений, выше приблизительно на два порядка величины.

Группу 4 составляют фосфор- и фторсодержащие молекулы. К сожалению, в нашу модель включена лишь базовая химия этих классов соединений, и, как видно из рис. 2, существенных изменений в обилиях молекул данной группы не наблюдается. Поэтому в данной работе мы не приводим анализ особенностей формирования молекул данной группы.

В группе 5 представлена сложная органика и связанные с ней ионы. Только одна молекула в группе, метанол, достигает максимального содержания  $10^{-11}$ , являющегося достаточно высоким, чтобы быть обнаруженным в наблюдениях. Интересно, что это содержание достигается в модели с клампами размером 0.1 а.е. В однородной модели, как и в модели с клампами размером 1.0 а.е., максимальное содержание метанола меньше на один порядок величины. Такое поведение метанола объясняется тем, что метанол образуется в реакциях гидрирования молекулы CO на поверхности пылевых частиц. В моделях с клампами скорость аккреции атомов и молекул из газа на пыль выше, чем в однородной модели. Это увеличивает скорость образования метанола. С другой стороны, в моделях с клампами непрозрачность среды ( $A_V$ ) по сравнению с однородной моделью ниже. Следовательно, скорость разрушения метанола ультрафиолетовыми фотонами выше. В модели с клампами размером 0.1 а.е. баланс образования и разрушения метанола смещается в пользу образования, и содержание метанола оказывается максимальным среди трех моделей. В модели с клампами размером 1.0 а.е. баланс таков, что результи-

рующее максимальное содержание метанола оказывается таким же, как и в однородной модели.

Группа 6 отражает химически разнородные молекулы. Как видно из рис. 3, обилия большинства молекул в данной группе почти не изменяются при использовании моделей с клампами. Исключениями являются две важные молекулы, чьи обилия при использовании модели с клампами возрастают,  $H_2$  и  $C_3$ . В модели диффузной среды с клампами разных размеров формирование молекулярного водорода ускоряется на поверхности пылевых частиц, а самоэкранирование “защищает” от быстрого разрушения в более прозрачной среде. Поэтому образование молекулярного водорода из атомарного занимает приблизительно на порядок меньше времени, чем в однородной модели [12]. Образование молекулы  $C_3$  во всех моделях происходит за счет реакции диссоциативной рекомбинации иона  $C_3H^+$ , который, в свою очередь, образуется через реакцию с молекулярным водородом:



Как можно отметить, образование молекулы  $C_3$  оказалось тесно связано с количеством молекулярного водорода в среде сразу на двух этапах: на моменте формирования иона  $C_3H^+$  и при формировании молекулы  $C_2H$  (об этом подробнее написано выше в дискуссии о химической эволюции молекул из группы 1). Содержания молекулы  $C_3$  в моделях с клампами приближаются к значениям содержаний, полученных из наблюдений, однако не достигают их приблизительно на полтора порядка величины (см. табл. 4). Молекула  $C_3$  широко наблюдается в диффузной среде вдоль различных лучей зрения [37]. Это может означать, что она эффективно образуется в широком диапазоне физических условий, характерных как для относительно плотных “полупрозрачных” (translucent) областей, так и для условий обычных молекулярных диффузных областей, рассматриваемых в этой работе. В этом случае высокие содержания этой молекулы в диффузном газе, характеризующем малыми значениями  $A_V$ , могут стать индикаторами возможного существования компактных газопылевых клампов в такой среде.

Приведенные выше результаты свидетельствуют о том, что компактные газопылевые сгустки (клямпы) размером 0.1–1.0 а.е., возможность формирования которых в межзвездной среде показана в работе [10], оказывают ограниченное влияние на химическую эволюцию молекул и ионов, наблюдаемых вдоль лучей зрения в направлении на диффузную межзвездную среду.

Хотя содержания некоторых молекул в моделях с клампами могут возрасти на несколько порядков величины, они не приближаются к значениям содержаний, полученных из наблюдений. Последние все еще оказываются на 2–3 порядка выше модельных величин. Поскольку очевидно, что ключевым фактором, влияющим на химию в диффузном и полупрозрачном (translucent) газе является непрозрачность среды  $A_V$ , мы выполнили тестовые расчеты моделей, полностью аналогичных рассматриваемой в статье однородной модели без клампов, но с  $A_V = 2$  и 3. Полученные результаты показали, что более высокие значения  $A_V$  оказывают существенно большее влияние на содержания молекул, нежели клампы, и позволяют добиться согласия модельных и наблюдаемых концентраций для значительно большего числа соединений. На основании этого можно сделать вывод о том, что высокие содержания ряда молекул, наблюдаемые на лучах зрения в направлении на диффузную среду, в действительности достигаются не в самом диффузном газе, характеризующемся малой плотностью и значением  $A_V < 1$ , а скорее всего, в областях более плотного газа, находящихся на луче зрения, и окруженных диффузным газом. Данный вывод согласуется с мнениями авторов ряда других исследований молекулярного состава диффузной межзвездной среды ([3] и ссылки в этой работе).

Таким образом, по результатам проделанной работы можно сделать следующие основные выводы:

1. Введение компактных газопылевых сгустков (клампов) в астрохимические модели диффузной среды приводит к увеличению модельных содержаний ряда молекул по сравнению со значениями, получаемыми в стандартных моделях диффузной среды, предполагающих однородное распределение пыли в газе. Однако, как правило, увеличившиеся модельные содержания остаются на 2–3 порядка ниже значений содержаний молекул, полученных из наблюдений диффузной среды.

2. При использовании модели с клампами радиуса 0.1 и 1.0 а.е. удалось объяснить отношения обилий молекул  $C_2H/HCO^+$ ,  $HCN/C_2H$ ,  $CS/HCN$  и  $OH/CH$ . При этом во всех трех моделях (однородной и с клампами разных радиусов) есть отношения, которые одинаково плохо сходятся с наблюдаемыми значениями ( $C_4H/C_2H$ ,  $HC_3N/HCN$  и  $SO_2/HCO^+$ ), но в модели с клампами радиуса 1 а.е. величины этих отношений становятся выше, что чуть больше соответствует данным наблюдений. Для более точного анализа влияния новой модели на химическую эволюцию конкретных молекул необходимо произвести моделирование диффузной среды с параметрами, соответствующими тем объектам, где эти молекулы

были задетектированы, что является интересной задачей для последующих исследований.

3. Проведены тестовые расчеты моделей, идентичных модели с однородным распределением пыли в газе, но со значениями экстинкции  $A_V = 2$  и 3. Обнаружено, что более высокие значения  $A_V$  влияют на химию гораздо сильнее, чем введение в модель клампов, и позволяют воспроизвести большее число концентраций молекул, хотя и не всех. Этот результат подтверждает предположение ряда авторов, что высокие содержания ряда молекул в диффузной среде невозможно объяснить моделью собственно диффузной фазы (малые плотность и  $A_V$ ), и что наблюдаемые высокие концентрации ряда молекул на лучах зрения в диффузной среде происходят из областей более плотного и менее прозрачного “translucent” газа.

4. Тем не менее клампы могут быть ответственны за высокие концентрации молекул, поскольку ускоряют на порядок переход  $N \rightarrow N_2$ , и тем самым способствуют ускоренному формированию более плотных translucent областей.

#### ФИНАНСИРОВАНИЕ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00645. Работа С.Ю.П. была выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, тема № FEUZ-2020-0030. В.А. Соколова и А.И. Васюнин являются членами Партнерской группы института Макса Планка (the Max Planck Partner Group) на базе Уральского федерального университета.

#### БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы благодарны А.В. Ивлеву за продуктивные дискуссии в процессе работы над статьей.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. D. H. Wooden, S. B. Charnley, and P. Ehrenfreund, *Composition and evolution of interstellar clouds*, edited by M. C. Festou, H. U. Keller, and H. A. Weaver (Tucson: University of Arizona Press, 2004), p. 33.
2. A. G. G. M. Tielens, *The physics and chemistry of the interstellar medium* (New York: Cambridge University Press, 2005).
3. T. P. Snow and B. J. McCall, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **44**, 367 (2006).
4. R. Lucas and H. S. Liszt, *Astron. and Astrophys.* **358**, 1069 (2000).
5. H. Liszt and R. Lucas, *Astron. and Astrophys.* **370**, 576 (2001).
6. R. Lucas and H. S. Liszt, *Astron. and Astrophys.* **384**, 1054 (2002).

7. *D. A. Neufeld, B. Godard, M. Gerin, G. Pineau des Forêts, et al.*, *Astron. and Astrophys.* **577**, id. A49 (2015).
8. *M. Gerin, M. de Luca, J. Black, J. R. Goicoechea, et al.*, *Astron. and Astrophys.* **518**, id. L110 (2010).
9. *B. Godard, E. Falgarone, M. Gerin, and D. C. Lis*, *Astron. and Astrophys.* **540**, id. A87 (2012).
10. *V. N. Tsytovich, A. V. Ivlev, A. Burkert, and G. E. Morfill*, *Astrophys J.* **780**, id. 131 (2014).
11. *A. B. Ostrovskii, et al.*, *Monthly Not. Roy. Astron. Soc.* **495**, 4314 (2020).
12. *A. V. Ivlev, A. Burkert, A. Vasyunin, and P. Caselli*, *Astrophys J.* **861**, id. 30 (2018).
13. *G. Morfill*, *Plasma Phys. Rep.* **26** (8), 682 (2000).
14. *R. Bingham and V. N. Tsytovich*, *Astron. and Astrophys.* **376**, L43 (2001).
15. *V. N. Tsytovich and K. Watanabe*, *Contrib. Plasma Phys.* **43** (2), 51 (2003).
16. *S. A. Khrapak, A. V. Ivlev, and G. Morfill*, *Phys. Rev. E* **64** (4), id. 046403 (2001).
17. *A. I. Vasyunin and E. Herbst*, *Astrophys J.* **769**, id. 34 (2013).
18. *R. T. Garrod and E. Herbst*, *Astron. and Astrophys.* **457**, 927 (2006).
19. *V. A. Sokolova, A. B. Ostrovskii, and A. I. Vasyunin*, *Astron. Rep.* **61** (8), 678 (2017).
20. *M. Asplund, N. Grevesse, and A. J. Sauval*, *Nuclear Phys. A* **777**, 1 (2006).
21. *S. Yamamoto*, *Introduction to Astrochemistry. Chemical Evolution from Interstellar Clouds to Star and Planet Formation* (Tokyo: Springer Japan, 2017).
22. *N. Indriolo and B. J. McCall*, *Astrophys. J.* **745** (1), id. 91 (2012).
23. *A. I. Vasyunin, A. M. Sobolev, D. S. Wiebe, and D. A. Semenov*, *Astron. Lett.* **30**, 566 (2004).
24. *J. C. Laas and P. Caselli*, *Astron. and Astrophys.* **624**, id. A108 (2019).
25. *J. Chantzos, V. M. Rivilla, A. Vasyunin, E. Redaelli, L. Bizzocchi, F. Fontani, and P. Caselli*, *Astron. and Astrophys.* **633**, id. A54 (2020).
26. *V. Thiel, A. Belloche, K. M. Menten, R. T. Garrod, and H. S. P. Müller*, *Astron. and Astrophys.* **605**, id. L6 (2017).
27. *H. Liszt, R. Lucas*, *Astron. and Astrophys.* **391**, 693 (2002).
28. *H. S. Liszt, R. Lucas and J. Pety*, *Astron. and Astrophys.* **448**, 253 (2006).
29. *P. Crane, D. Lambert, and Y. Sheffer*, *Astrophys. J. Suppl.* **99**, 107 (1995).
30. *M. Gerin, M. Luca, J. Goicoechea, E. Herbst, et al.*, *Astron. and Astrophys.* **521**, L16 (2010).
31. *K. M. Menten, F. Wyrowski, A. Belloche, R. Güsten, L. Dedes, and H. S. P. Müller*, *Astron. and Astrophys.* **525**, id. A77 (2011).
32. *D. A. Neufeld, E. Falgarone, M. Gerin, and B. Godard*, *Astron. and Astrophys.* **542**, id. L6 (2012).
33. *J. F. Corby, B. A. McGuire, E. Herbst, and A. J. Remijan*, *Astron. and Astrophys.* **610**, id. A10 (2018).
34. *M. Gerin, D. A. Neufeld, and J. R. Goicoechea*, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **54** (1), 181 (2016).
35. *H. Liszt, M. Gerin, A. Beasley, and J. Pety*, *Astrophys. J.* **856** (2), id. 151 (2018).
36. *M. Gerin, H. Liszt, D. Neufeld, B. Godard, P. Sonnentrucker, J. Pety, and E. Roueff*, *Astron. and Astrophys.* **622**, id. A26 (2019).
37. *T. Oka, J. Dahlstrom, B. McCall, S. Friedman, L. Hobbs, P. Sonnentrucker, D. Welty, and D. York*, *Astrophys. J.* **582**, 823 (2008).