



Космохимия

Молекулы в космосе

Д.З. ВИБЕ,
доктор физико-математических наук
ИНАСАН

В настоящее время известно о существовании в межзвездной и околозвездной среде более полутора сотен различных химических соединений, начиная с простейших двухатомных молекул и заканчивая сложной органикой. Изучение свойств этих молекул, а также процессов,



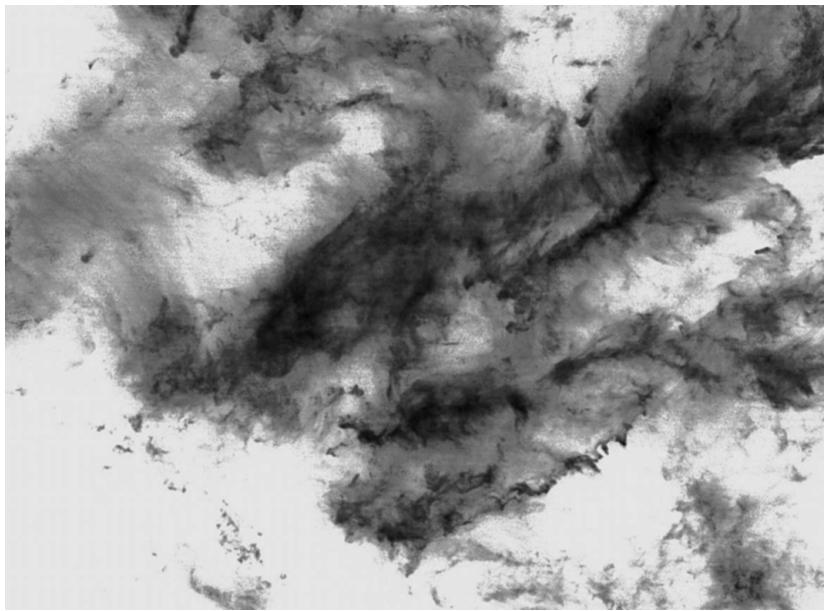
приводящих к их синтезу, способно “пролить свет” на тайны образования звезд и планетных систем вокруг них, а, может быть, – и на происхождение самой жизни. Задача исследования межзвездных молекул весьма сложна и требует больших усилий наблюдателей и теоретиков.

ОТКРЫТИЕ МОЛЕКУЛ ВО ВСЕЛЕННОЙ

На первый взгляд, космическое пространство кажется не самым подходящим местом для существования молекул. Чрезвычайно низкая плотность и температура, жесткое излучение – представить себе химические реакции в таких условиях довольно сложно. Поэтому обнаружение молекул в межзвездной среде в конце 1930-х гг. по линиям поглощения

в оптическом диапазоне оказалось совершенно неожиданным. Понапалу существование межзвездных молекул не выглядело серьезной проблемой – появление нескольких простых молекул ($\text{CH}, \text{CN}, \text{CH}^+$) в межзвездной среде (МЗС) можно было объяснить выбросом их с поверхности звезд. О том, что молекулы существуют в звездных атмосферах, стало известно в начале XX века.

Исследование межзвездной химии началось после появления радиоастрономии. В конце 1940-х И.С. Шкловский предсказал, что в радиодиапазоне регистрируется не только поглощение, но и излучение молекул. Эта догадка подтвердилась в 1963 г., когда по наблюдениям на длине волны 18 см в межзвездной среде ученые обнаружили молекулу гидроксила (OH). Через несколько лет в космосе нашли молекулы аммиака (NH_3),



Карта комплекса молекулярных облаков в созвездии Тельца в линии излучения молекулы оксида углерода. 2008 г.

воды (H_2O), формальдегида (H_2CO), оксида углерода (CO) и более сложные молекулы. К настоящему времени количество известных химических соединений в космосе перевалило за полторы сотни (без учета изомеров).

ЗАГАДКА МЕЖЗВЕЗДНОГО ХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

Чем больше обнаруживалось в космосе молекул, тем острее вставал вопрос об их происхождении. Даже если допустить, что простые молекулы, подобные CH и CH^+ , “улетают” с поверхности звезд, откуда взялись более сложные соединения? Предложенный в качестве альтернативы механизм формирования молекул непосредственно в межзвездной среде – радиативная ассоциация (простое объединение атомов в молекулы) – оказался крайне неэффективным.

В 1973 г. нашлось окончательное объяснение – атомы гораздо охотнее взаимодействуют друг с другом и с простыми молекулами при условии, если один из них ионизован. (При низкой плотности межзвездной среды в реакциях всегда участвует только два реагента.) По современным представлениям, химические процессы в межзвездной среде инициируются космическими лучами. Эти частицы (атомные ядра), разогнанные каким-то механизмом до близких к световым скоростей, способны проникать в глубь плотных межзвездных облаков. Они ионизуют часть атомов и запускают тем самым сложное переплетение химических превращений. Главную роль в них играет водород – самый распространенный элемент во Вселенной. Первичные

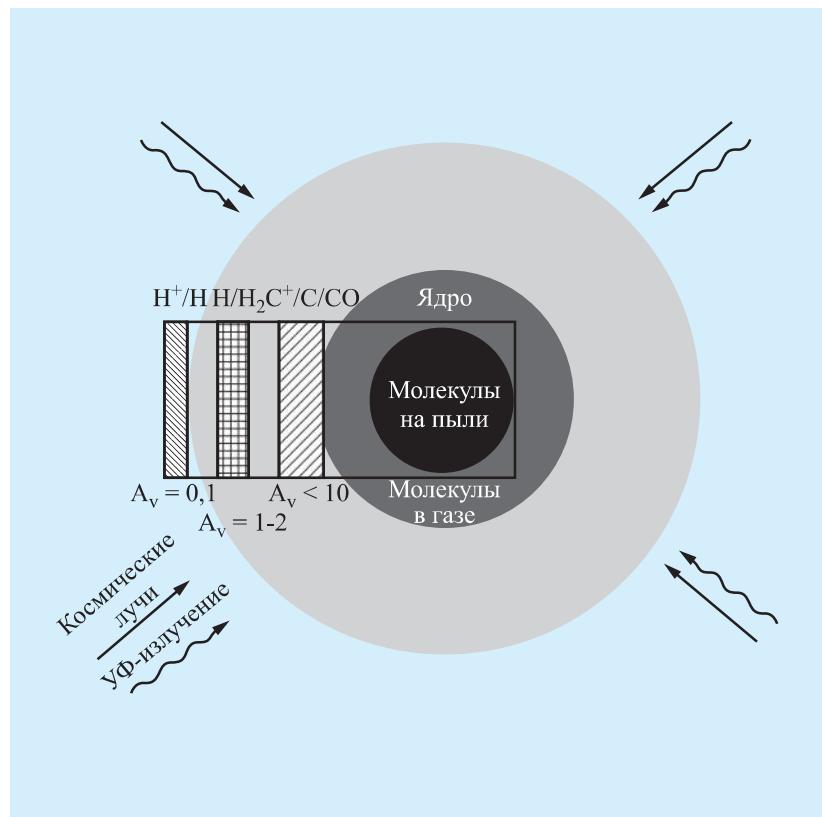
цепочки реакций с атомами и ионами кислорода, азота и углерода приводят к появлению соединений водорода с другими распространенными атомами: в частности, к формированию воды, аммиака и метана.

В перекрестных реакциях между промежуточными продуктами этих цепочек (радикалами CH , OH и другими) рождается вторая по распространенности молекула в межзвездной среде – молекула оксида углерода (CO). По концентрации она уступает только молекуле водорода (H_2), но уступает значительно: в десяток тысяч раз, а то и меньше. Последующие реакции все более и более усложняют химический состав облака, и нам по большому счету до сих пор неясно, до какой степени молекулярной сложности могут довести эти реакции. Благодаря совершенствованию наблюдательной техники в межзвездных облаках теперь удается детектировать сложные органические соединения, вплоть до молекул, содержащих более 10 атомов. Уже несколько раз сообщалось о наблюдениях

Схема строения дозвездного ядра молекулярного облака. Рисунок Д.З. Вибе.

в межзвездной среде простейшей аминокислоты – глицина. Правда, потом эти сообщения всякий раз оспаривались; ибо чем сложнее молекула, тем труднее доказать достоверность ее наблюдения. Рано или поздно глицин в космосе “окончательно” обнаружат. В любом случае сейчас не вызывает сомнений, что в плотных межзвездных облаках природа способна вплотную “подобраться” к аминокислотам.

При всех успехах в объяснении эволюции межзвездной органики довольно долго оставался открытый вопрос о том, откуда в плотных облаках берется молекула водорода. С одной стороны, очевидно, что в плотной межзвездной среде молекула H_2 представляет собой основную форму существования водорода, поэтому плотные газопылевые облака и заслужили наименование молекулярных. С другой стороны, объединить в молекулу два атома водорода гораздо сложнее, чем, скажем, атом водорода и атом углерода. И здесь важнейшим химическим фактором оказывается космическая пыль. Два атома водорода не



способны слиться в молекулу в газовой фазе, но эта реакция происходит на поверхности космических пылинок, к которым атомы водорода способны “примерзать”. Если пылинка не слишком холодна (теплее 10 K), то атомы совершают тепловые передвижения по ее поверхности и иногда сталкиваются друг с другом. При участии двух атомов водорода они объединяются в молекулу, а энергия, выделившаяся в результате реакции, “отрывает” новорожденную молекулу от пылинки и “выбрасывает” ее в окружающую среду.

В поверхностных реакциях могут рождаться не только молекулы водорода, но и такое сложное соединение, как мета-

нол (CH_3OH). Эксперименты показали, что в газовой фазе реакции его образования проходят с очень низкой скоростью, которой недостаточно, чтобы объяснить измеренное содержание молекулы метанола. Куда более эффективными оказываются “поверхностные” реакции: в начале цепочки синтеза метанола лежит молекула CO, которая в холодных условиях молекулярных облаков также “примерзает” к пылинкам, где к ней последовательно добавляются четыре атома водорода. Появлением метанола поверхностный синтез не ограничивается; образуются и другие молекулы, в том числе многоатомные органические соединения.

Межзвездные молекулы (за редким исключением) наблюдаются в газовой фазе, а не в ледяных мантиях пылевых частиц, поэтому должен существовать какой-то механизм, способный “испарять” эти мантии. Традиционно такими основными механизмами считаются тепловая десорбция (испарение мантии в результате нагрева пылинки) и фотодесорбция (разрушение мантии фотонами). В обоих случаях для десорбции необходим близкий источник излучения; предположительно в плотном молекулярном облаке ими могут быть только что образовавшиеся протозвезды. Они нагревают окружающее вещество, испаряют ледяные оболочки пылинок и тем самым переводят синтезированную на пылинках органику в газовую фазу. Правда, некоторые молекулы, включая тот же метанол, наблюдаются и в холодных облаках, где еще нет протозвезд. Возможно, что какую-то роль в разрушении мантий пылинок играет реактивная десорбция – то есть десорбция в результате выделения энергии в “поверхностных” химических реакциях.

Содержание молекул в плотных газопылевых облаках определяется сложным переплетением различных процессов, скорости протекания которых сильно зависят от температуры, плотности,

свойств поля излучения, от потока космических лучей... Внутри облака эти параметры существенно варьируются, и молекулы также распределены очень неоднородно: некоторые более эффективно синтезируются в плотном ядре облака, другие сосредоточены в основном на периферии.

В целом, молекулярная структура таких ядер определяется проникновением в них ультрафиолетового излучения и космических лучей; она состоит из двух ключевых переходов – от атомарного (частично ионизованного) водорода к молекулярному водороду и от ионизованного и атомарного углерода – к молекулам CO. В центральной, наиболее холодной части ядра газ обеднен молекулами, так как они вымораживаются на пылинках, образуя на них ледяные мантии.

Эта неоднородность очень важна с точки зрения интерпретации полученных данных. Самая распространенная в космосе – молекула водорода – в условиях, характерных для межзвездных облаков, не способна генерировать наблюдаемое излучение. Основная масса газа облаков остается для нас невидимой, и об их состоянии нам приходится судить по наблюдениям перечисленных выше соединений. Но из-за неоднородности

пространственного распределения молекул излучение каждой из них несет информацию о каком-то специфическом регионе облака. Собрать из этой мозаики цельную картину можно лишь при условии, что мы детально разберемся в своеобразии межзвездных химических процессов и в их связи с физической эволюцией межзвездной среды вообще и молекулярных облаков в частности.

ТАМ, ГДЕ ХИМИЯ ВСТРЕЧАЕТСЯ С ДИНАМИКОЙ

Начиная с 1994 г., в Институте астрономии РАН ведутся исследования в области молекулярной эволюции межзвездных облаков, – когда доктор физико-математических наук Б.М. Шустов предложил разработать астрохимическую модель протозвездного объекта, которая бы (в отличие от прочих подобных разработок) была бы сопряжена с динамической моделью эволюции межзвездного вещества.

Как упоминалось, для численного исследования химических реакций необходимо знать как минимум температуру, плотность и свойства поля излучения. До сих пор во многих работах, посвященных астрономической химии звездообразования, этим параметрам присваивают некие “типичные” значения, пренебрегая их эволюцией.

В более сложных моделях учитываются изменения физических параметров в процессе протозвездной эволюции, однако химические реакции рассчитываются “поверх” этих изменений, без учета обратной связи. Однако в реальности такая обратная связь существует. Например, некоторые молекулы (в первую очередь молекула оксида углерода) играют важную роль в установлении температуры облака, так как их излучение является важным каналом для потери энергии из него. Далее, от содержания молекулярных ионов зависит степень ионизации вещества облака, а значит – эффективность его взаимодействия с галактическим магнитным полем.

Химическая эволюция межзвездного облака определяется физическими условиями в нем и их изменением со временем, а физические условия существенно зависят от содержания ряда “ключевых” молекул. В нашем институте разработана модель, в которой физическая и химическая эволюции рассматриваются одновременно и самосогласованно. Это означает, что мы не только учтем изменение физических условий (плотности, температуры, параметров поля излучения) при вычислении скоростей химических процессов, но и принимаем во внимание зависимость физических

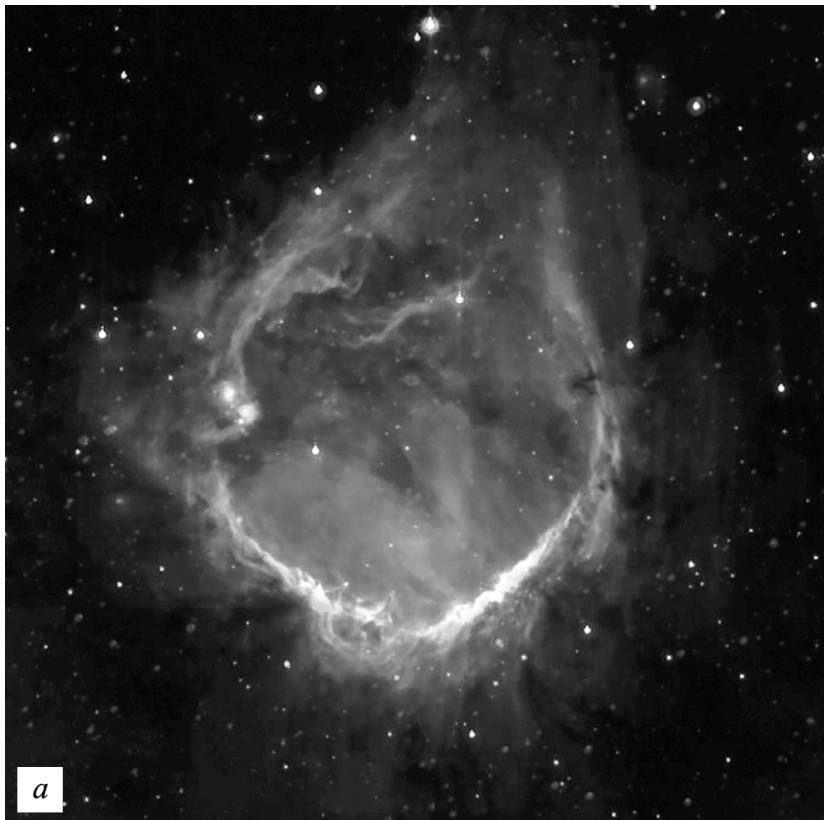
условий от текущего молекулярного состава вещества. В конце 1990-х гг. были опубликованы результаты исследований, выполненных с ее помощью, посвященные эволюции одномерных протозвездных объектов. Сейчас ученые Института в сотрудничестве с коллегами из Южного федерального университета с помощью этого же подхода моделируют более сложные объекты – protoplanетные диски у звезд. Цель этих исследований состоит в том, чтобы предсказать, как будет выглядеть при наблюдениях в линиях молекул динамически эволюционирующий диск с образующимися protoplanетными сгустками, вспышками на звезде и прочими “атрибутами” молодой звездно-планетной системы.

ЗОНЫ ИОНИЗОВАННОГО ВОДРОДА

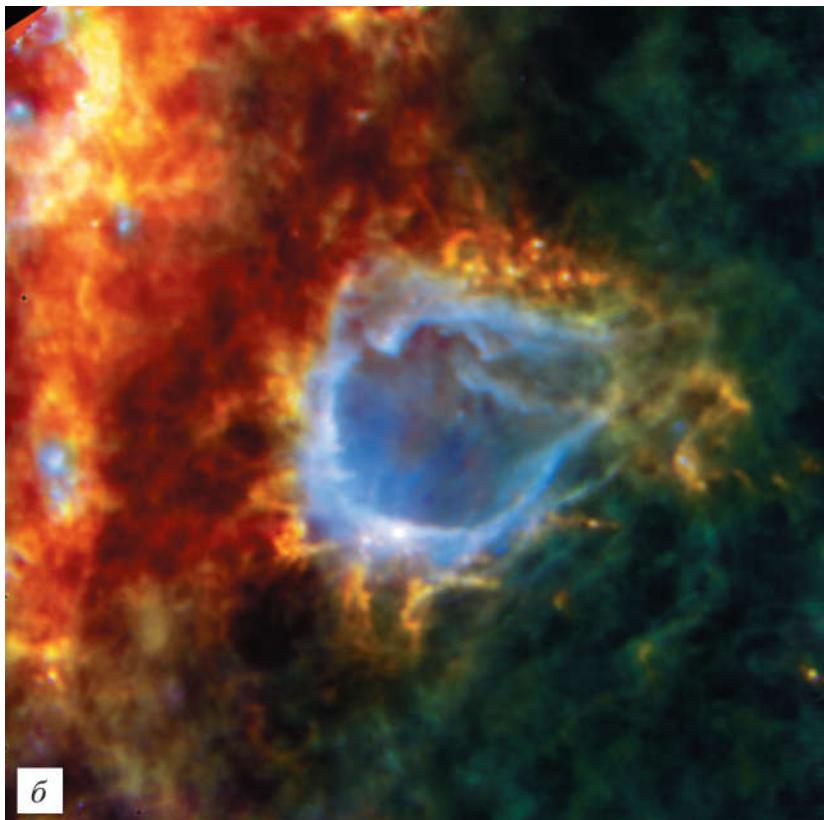
Второе направление исследования динамической и химической эволюции звезд – моделирование процессов, происходящих в веществе, окружающем молодую массивную звезду. У таких звезд значительная доля излучения имеет длину волны менее 91,2 нм; этого достаточно для ионизации водорода. В результате вокруг таких звезд и их скоплений возникают зоны ионизованного водорода (области HII) с температурой

внутри них порядка 10^4 К. Она существенно превышает температуру газа в родительском молекулярном облаке (10–20 К), поэтому тепловое давление “заставляет” область расширяться, “сметая” окружающий газ в плотную оболочку. Внутри нее происходит переход от горячего (преимущественно атомарного и ионизованного) газа к холодному (молекулярному) – формируется фотодиссоциационная область. В ней происходят разнообразные физико-химические процессы, связанные с испарением ледяных мантий и фотодиссоциацией газофазных молекул. Наблюдения указывают, что с этим этапом в жизни молодой звезды связано появление особого вида молекулярного излучения молекул гидроксила, воды, метанола – мазерного. До сих пор непонятны причины появления такого излучения и его точная локализация в области HII (или ее окрестностях). Не ясно даже, формируют ли мазеры на разных молекулах некую эволюционную последовательность?

Ответить на эти вопросы призвана разработанная в нашем институте химико-динамическая модель “Marion”, позволяющая исследовать эволюцию молекулярного состава в оболочке расширяющейся области HII. В моделировании динамики учитывается изменение



a



б

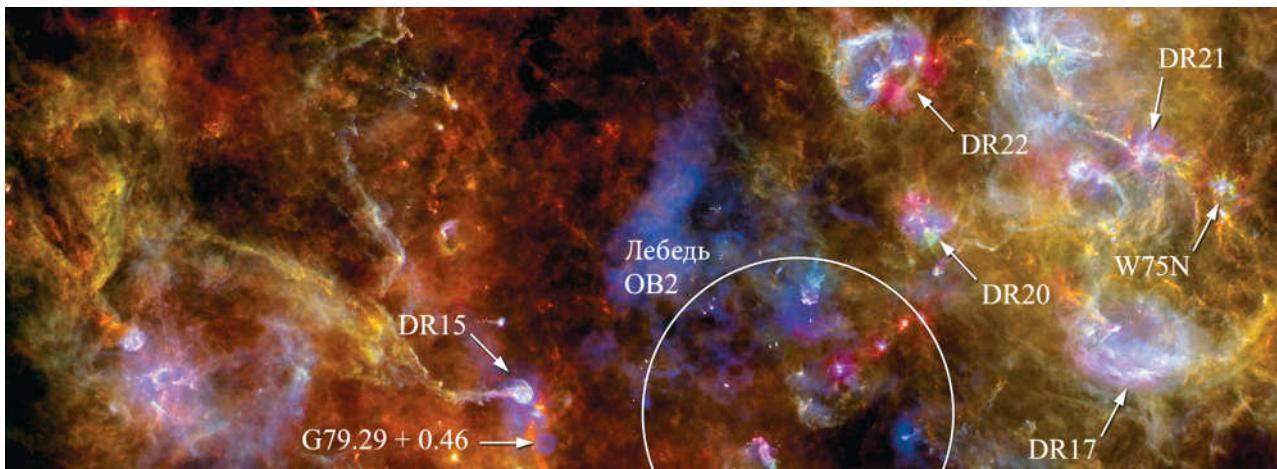
состава различных компонентов газа, а в моделировании химических процессов – изменение

физических параметров, что весьма важно в таком бурно эволюционирующем объекте. Модель

Область ионизованного водорода RCW120 (созвездие Скорпиона, расстояние – 1,4 кпк): *а* – в ближнем инфракрасном излучении, *б* – в дальнем ИК-диапазоне. Кольца инфракрасного излучения отмечают плотную молекулярную оболочку, сметенную при расширении горячего ионизованного газа. Изображения получены космическими обсерваториями “Спитцер” (6 сентября 2004 г.) и “Гершель” (22 марта 2011 г.). Фото NASA/JPL/ESA.

позволяет прослеживать, как и где именно различные молекулы попадают в газовую фазу с поверхностей пылинок, а также на каком участке фотодиссоциационной области происходит их диссоциация. Тем самым выделяется район пространства, из которой должно исходить молекулярное излучение (в том числе мазерное). Результаты работы программного комплекса “Marion” позволяют решать задачу о переносе излучения в области HII и создавать синтетические наблюдения, то есть предсказывать, как именно объект будет выглядеть при наблюдениях с использованием различных телескопов.

Модель “Marion” также используется нами для изучения эволюции более сложных молекул – полициклических ароматических углеводородов.



Комплекс звездообразования Лебедь-Х, в состав которого входит область DR21. Изображение получено космической обсерваторией "Гершель". Фото ESA/PACS/SPIRE.

В межзвездной среде присутствуют ароматические соединения, но в каком именно виде – пока неясно. Один из ключевых индикаторов полициклических ароматических углеводородов – сильное излучение близи длины волн 8 мкм. Карты областей HII свидетельствуют о том, что ароматические соединения в окрестностях молодых горячих звезд расположены своеобразно: излучение на длине волны 8 мкм окружает их замкнутыми кольцами или, по крайней мере, протяженными дугами, но никогда не встречается в непосредственной окрестности звезд. Инфракрасное излучение полициклических ароматических углеводородов

генерируется при поглощении ими ультрафиолетовых фотонов, поэтому ожидается, что вблизи источника УФ-излучения они будут светиться сильнее. Отсутствие же эмиссии означает, что полициклических ароматических углеводородов вблизи звезды нет, поскольку они, скорее всего, разрушаются под воздействием ее излучения. Химико-динамическая модель "Marion" позволяет детально исследовать развитие такого процесса.

Хорошим примером может служить область ионизованного водорода RCW120. В проекции на небесную сферу она окружена почти идеальным кольцом излучения на длине волны 8 мкм, принадлежащим макромолекулам полициклических ароматических углеводородов. Это кольцо свидетельствует о том, что внутри области HII полициклические ароматические углеводороды полностью разрушены. Наши расчеты показывают, что

если бы полициклические ароматические углеводороды содержались внутри области в той же пропорции, что и вне ее, то в центре кольца также наблюдалась бы яркая эмиссия на длине 8 мкм.

МЕЖЗВЕЗДНАЯ ОРГАНИКА

К сожалению, подобные модели, несмотря на постоянное совершенствование вычислительной техники, продолжают оставаться очень ресурсоемкими, поэтому многие астрохимические процессы в них приходится рассматривать очень упрощенно, а то и вовсе пренебрегать ими. Для более детального исследования этих процессов в ИНАСАН используются традиционные подходы: модели, в которых физические условия либо не меняются, либо меняются независимо от химических процессов.

Важным направлением работ мы считаем изучение эволюции содержания сложных органических молекул вproto-



звездных ядрах. Для того чтобы достигнуть цели, нам пришлось существенно дополнить астрохимическую модель, включив в нее такие наблюдаемые в межзвездной среде соединения, как метилформиат, метилцианид, диметиловый эфир и другие. Обновленная модель получила название “Presta” (Pre-Star). Она позволяет детально изучать молекулярную эволюцию протозвездных объектов в очень широком диапазоне с учетом возраста и их других параметров. Для тестирования обновленной модели мы выбрали два очень разных региона: плотную область в хорошо изученном газопылевом облаке TMC-1 в созвездии Тельца на расстоянии порядка 140 пк и участок области звездообразования DR21 (OH) в северной части

комплекса Лебедь-X на расстоянии 1,5 кпк. Район TMC-1 является “типичным представителем” рождения маломассивных звезд, причем этот процесс только начинается. Во втором регионе происходит (довольно активно) образование звезд с массой более десятка солнечных. Важно то, что оба региона детально исследованы с астрохимической точки зрения: в них оценено содержание десятков молекул, в том числе органических. Сопоставление этих оценок содержаний с результатами наших расчетов показало, что разработанная в ИНАСАН модель “Presta” прекрасно объясняет полученные данные. Сейчас она используется нами для исследования различных аспектов влияния космических пылинок на астрохимические

Часть антенн интерферометрической системы ALMA для наблюдений в субмиллиметровом диапазоне длин волн. Фото ALMA (ESO/NAOJ/NRAO).

процессы, определяется роль изучения в создании заряженных пылинок или с различными температурами.

Связь свойств пыли с химической эволюцией вещества особенно важна при детальном моделировании химической эволюции протопланетных дисков. В последние несколько лет оно стало важным направлением нашей работы и привело к созданию модели протопланетного диска “Andes”, разработанной нашими учеными в сотрудничестве с коллегами из Германии. В этой модели впервые одновременно с эволюцией молекулярного

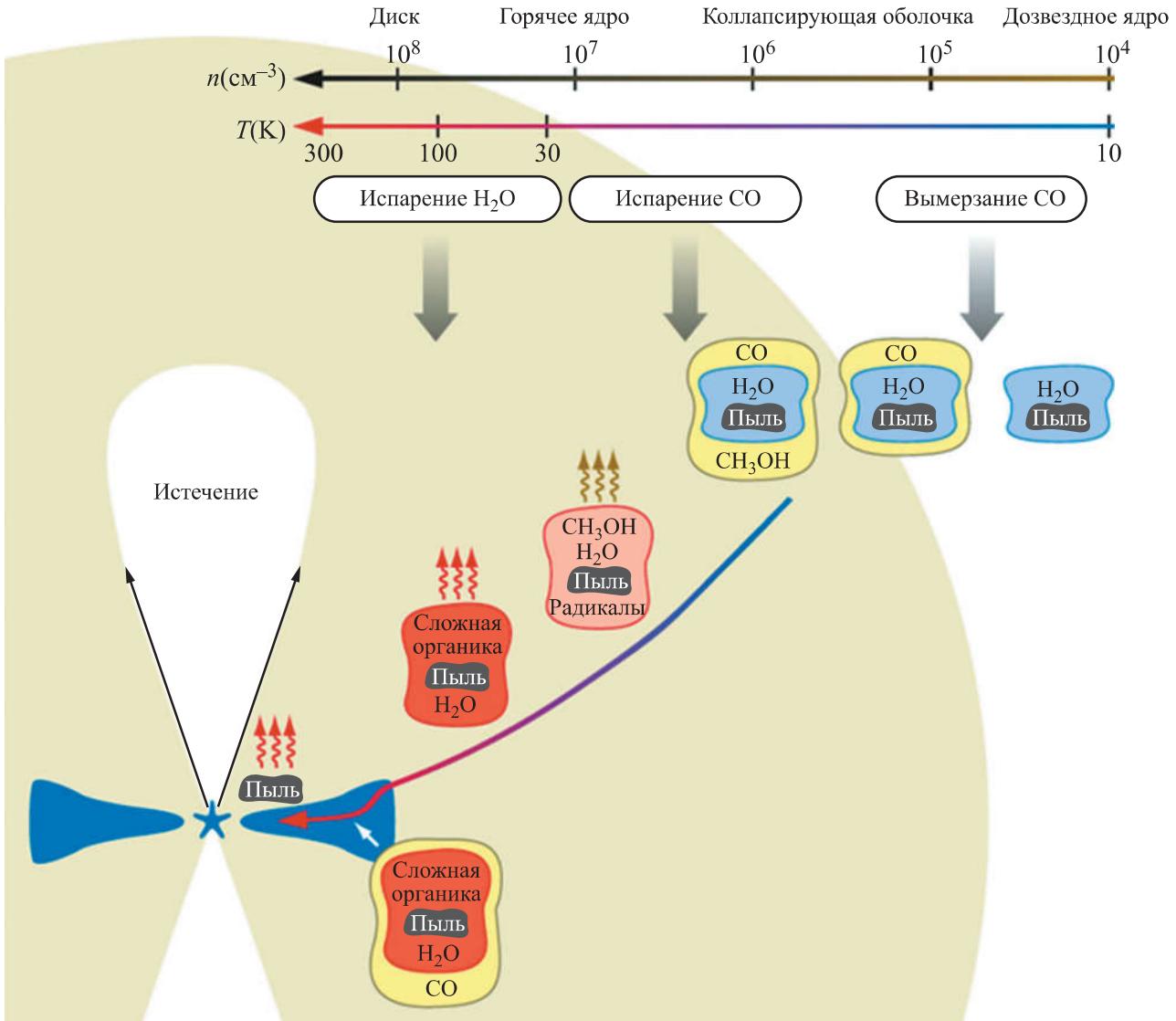


Схема эволюции молекулярного вещества в ходе формирования protопланетного диска. Рисунок ESO/NRAO.

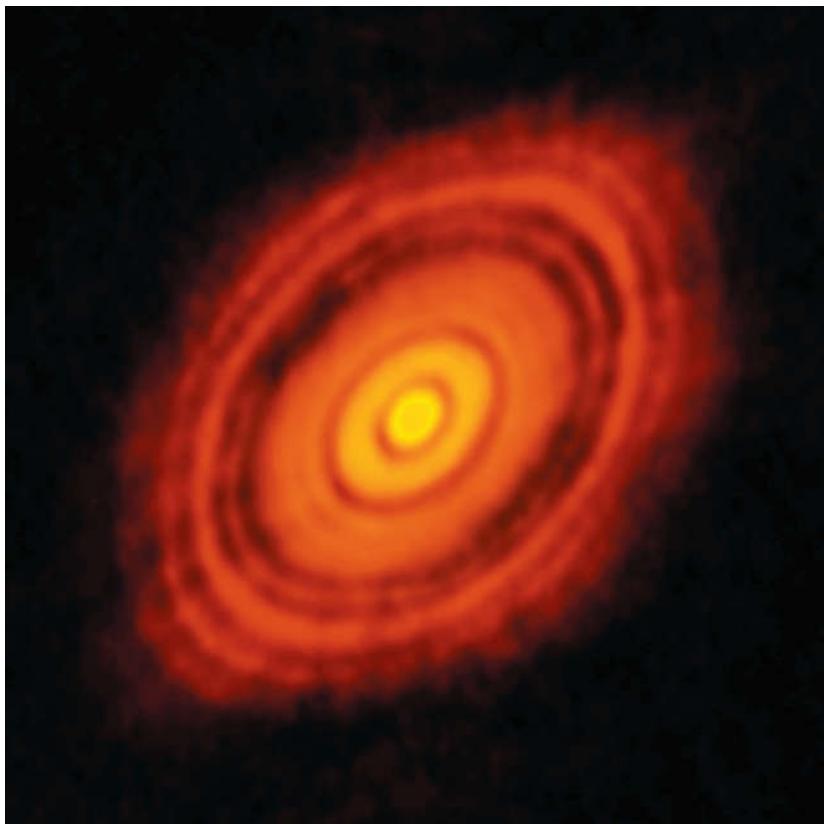
состава рассматривается и изменение размеров пылинок – неотъемлемого атрибута системы, в которой началось формирование планет.

МОЛЕКУЛЫ В ПРОТОПЛАНЕТНЫХ ДИСКАХ

Теоретическое изучение молекулярного сос-

тава protoplanетных дисков становится сейчас очень популярным направлением. Главным образом это связано с началом работы интерферометра субмиллиметрового диапазона ALMA (Атакамская большая антенная решетка миллиметрового диапазона – комплекс радиотелескопов, расположенных в чилийской пустыне Атакама, ESO), который позволяет получать детальную информацию о содержании молекул в газопылевых дисках у молодых звезд, похожих на

Солнце. Несмотря на то, что создано множество моделей, “изюминка” нашей состоит в том, что мы уделяем особое внимание именно protопланетному статусу диска. Если мы предполагаем, что в диске формируется (или будет формироваться) планетная система, то нам необходимо учесть в такой модели эволюцию свойств пылевых частиц – точнее их постепенный рост и оседание к плоскости симметрии диска (срединной области).



Протопланетный диск у звезды HL Tau. Одно из объяснений природы колец в диске связывает их происхождение с особенностями движения пылинок с ледяными молекулярными мантиями. Изображение получено в октябре–ноябре 2014 г. с помощью интерферометра ALMA. Фото ALMA (ESO/NAOJ/NRAO).

Распределение пылинок по размерам – важный космохимический фактор. Например, изменение соотношения между крупными и мелкими пылинками меняет прозрачность вещества: чем больше в среде крупных пылинок (при сохранении полной общей массы пыли), тем более среда прозрачна для ультрафиолетового излучения. Это означает, что на раннем этапе формирования планетной системы диск (из-за роста пылинок) более эффективно просвечивается ультрафиолетовым излучением, исходящим из окрестностей звезды, что усиливает диссоциацию молекул, разрушает ледяннуюmantию на пылинках и нагревает газ. Кроме того, укрупнение

пылинок сокращает их поверхность, доступную для протекания реакций синтеза органических соединений. Мы вправе ожидать, что начало роста планет отразится на молекулярном составе диска, причем в разных областях диска “отклик” будет различным, так как эволюция пыли везде протекает по-разному. До попадания в диск большая часть молекул находится в ледяных мантиях пылевых частиц; постепенно поверхностные химические процессы обогащают мантии органическими соединениями. При попадании в области диска, нагретые излучением звезды, мантии начинают испаряться, а молекулы, попав в газовую фазу, разрушаются

излучением. В непосредственных окрестностях звезды – где температура наиболее высока – разрушаются и сами пылинки.

В атмосфере диска, где плотность вещества невелика, рост пылинок происходит медленнее, при этом формирующиеся крупные пылинки не остаются на месте, а “опускаются” в срединную область диска. Там, в свою очередь, укрупнение пылинок происходит куда быстрее, но их количество пополняется за счет “выпадения” пылинок из внешних слоев диска. Естественно ожидать, что столь сложная эволюция пылинок в диске отразится на его молекулярном составе. Модель ANDES позволяет выявить те молекулы, наблюдения которых в будущем дадут нам возможность получить информацию о самом начальном этапе рождения планет.

Развитие астрохимических исследований в ИНАСАН происходит по нескольким направлениям. Продолжается со-

вершенствование модели "Andes". Пока рост пылинок в ней и химические процессы рассматриваются отдельно друг от друга, но для большей достоверности результатов их необходимо моделировать одновременно и согласованно. Мы предполагаем изучить, как может влиять на химические процессы электрический заряд пылинок. В модели "Marion" мы рассматриваем все более сложные

комплексы химических процессов, предполагая, что это позволит в деталях объяснить уже известные закономерности распределения молекул в окрестностях областей HII, а также предсказать новые закономерности. В сотрудничестве с коллегами из Германии в модель "Presta" включены дейтерированные соединения, что открывает возможности для интерпретации существенно

более широкого круга наблюдений.

Изучение межзвездных молекул является важным источником информации о процессах, сопровождающих рождение звездных и планетных систем. Отрадно, что в этой актуальной и интереснейшей области астрономии нам удается находиться на передовых позициях, сочетая и теоретические, и наблюдательные исследования.

Информация

Туманность от остатка сверхновой

25 июля 2016 г. Космический телескоп им. Хаббла получил изображение туманности DEM L316A, находящейся на расстоянии 160 тыс. св. лет от нас, в галактике-соседке – Большом Магеллановом Облаке. Эта туманность – остаток погибшей звезды в созвездии Золотой Рыбы, от взрыва которой образовались длинные волокна горячего ионизованного газа (см. стр. 1 обложки). Помимо DEM

L316A, КТХ нашел в данной галактике в 2010 г. и в 2013 г. еще два остатка сверхновых – туманности SNR 0509 и SNR 0519.

Взрыв, который сформировал туманность DEM L316A, относят к особенно грандиозным и ярким явлениям во Вселенной – образованию сверхновой типа Ia. Как правило, они вспыхивают в двойных системах, состоящих из двух белых карликов или из красного гиганта и белого карлика. В отличие от других типов сверхновых в этих по крайней мере одна из участвовавших во взрыве звезд полностью исчезает. Внешние слои умершей звезды выбрасываются в окружающее пространство на огромных скоростях, газ разогревается

и ионизуется, двигаясь сквозь межзвездное вещество. На месте "погибшей" звезды несколько тысяч лет остается светящееся облако из раскаленной плазмы и тяжелых элементов. Остатки сверхновых – большая редкость, поэтому внимание к ним астрономов – повышенное (Земля и Вселенная, 2008, № 1; 2009, № 6, с. 38; 2012, № 2, с. 19; 2015, № 2, с. 16). Изучая такие туманности, как DEM L316A, астрофизики пытаются установить: сценарий взрыва белых карликов одинаков или в далеком прошлом были такие, которые могли вести себя по-иному.

Пресс-релиз NASA,
25 июля 2016 г.