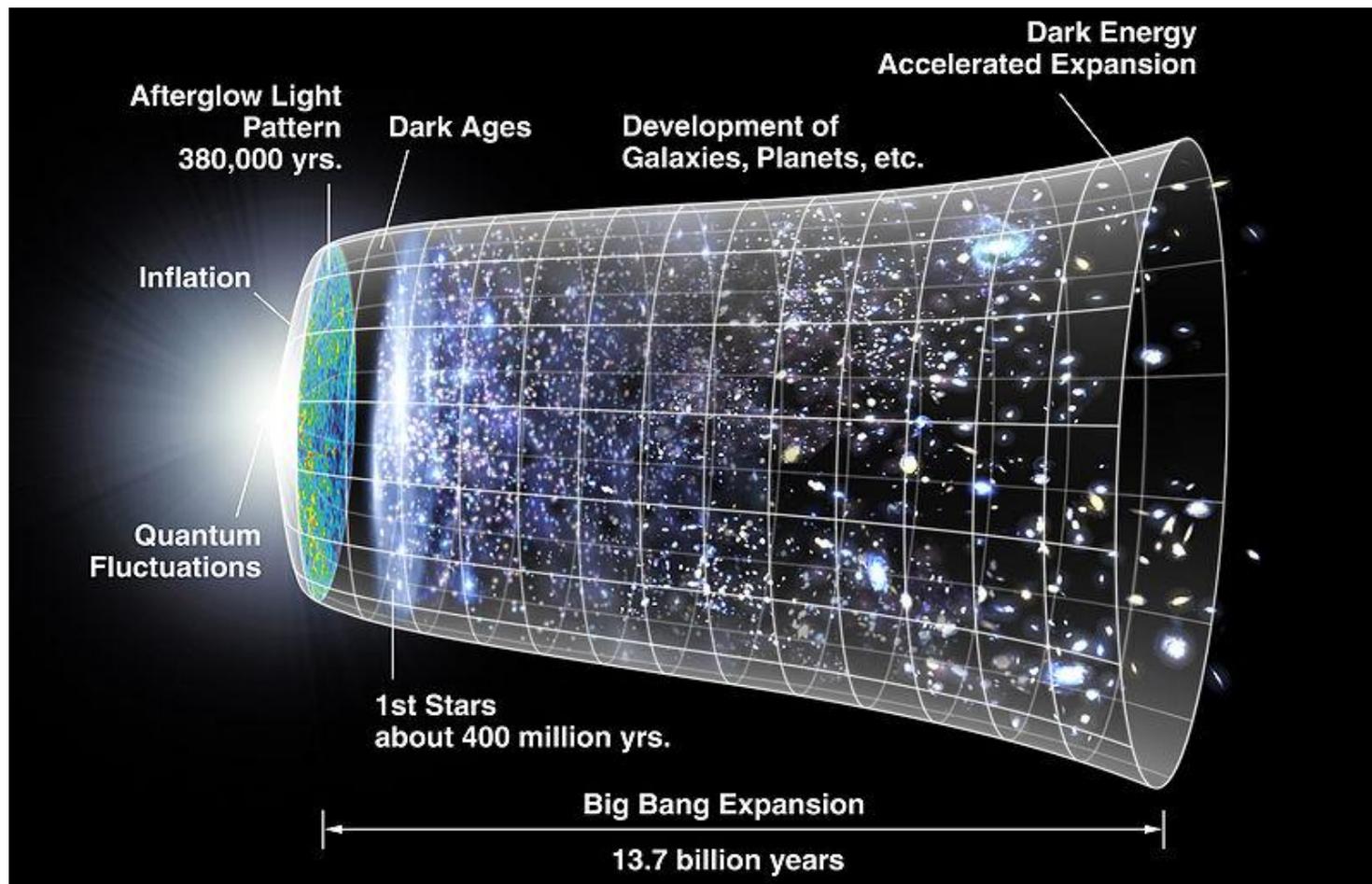




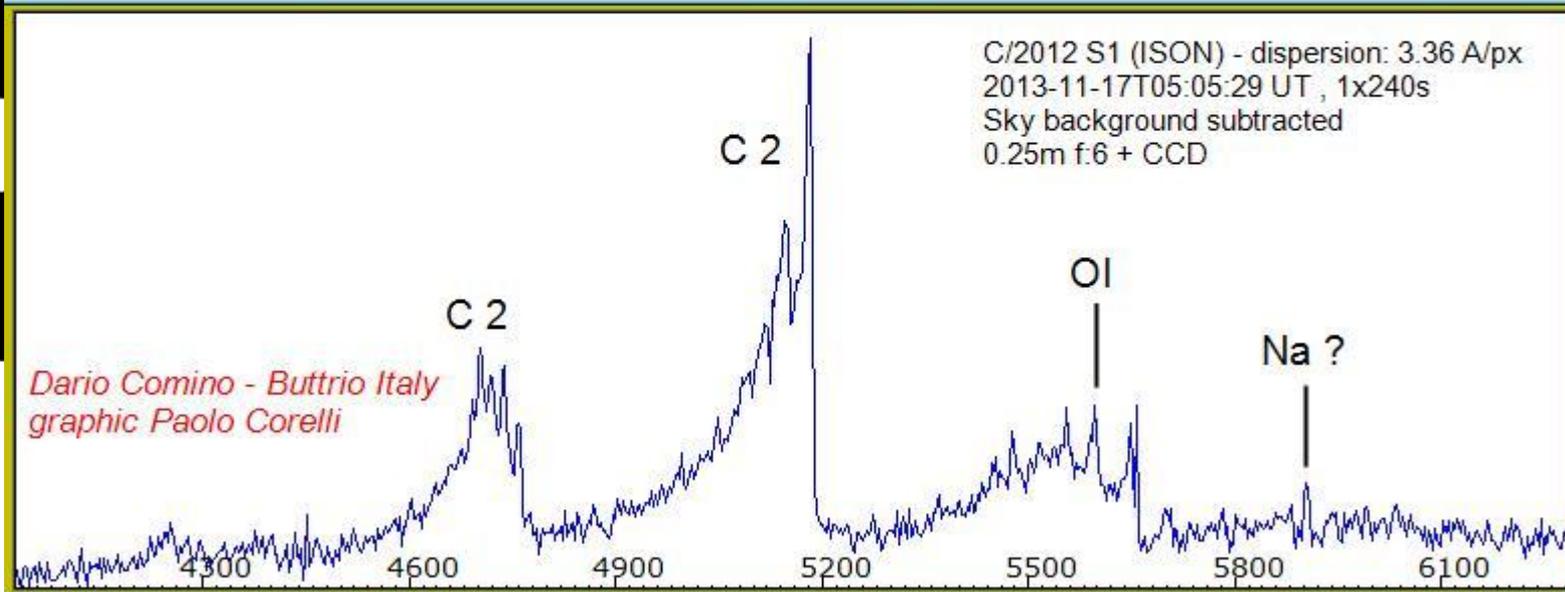
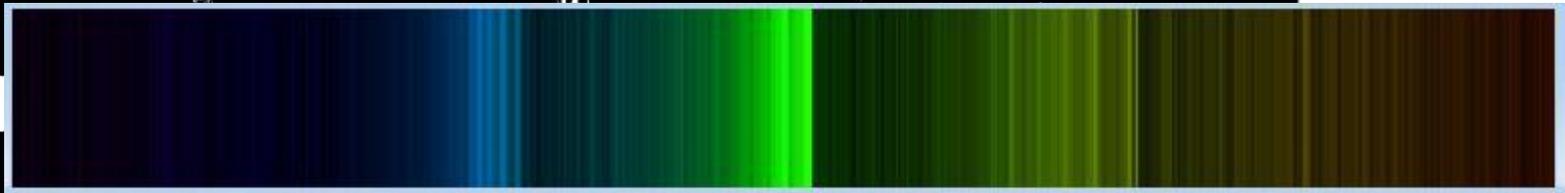
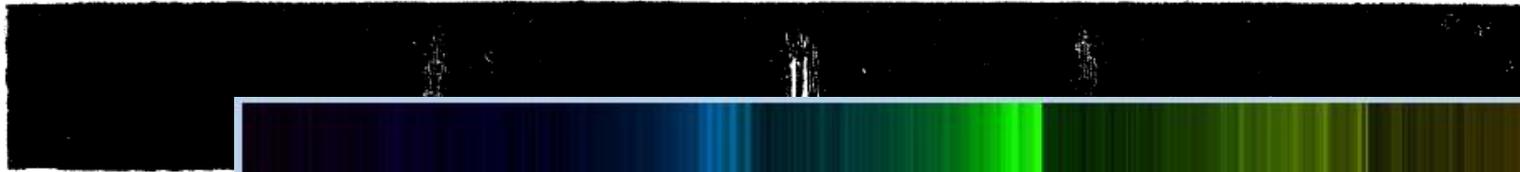
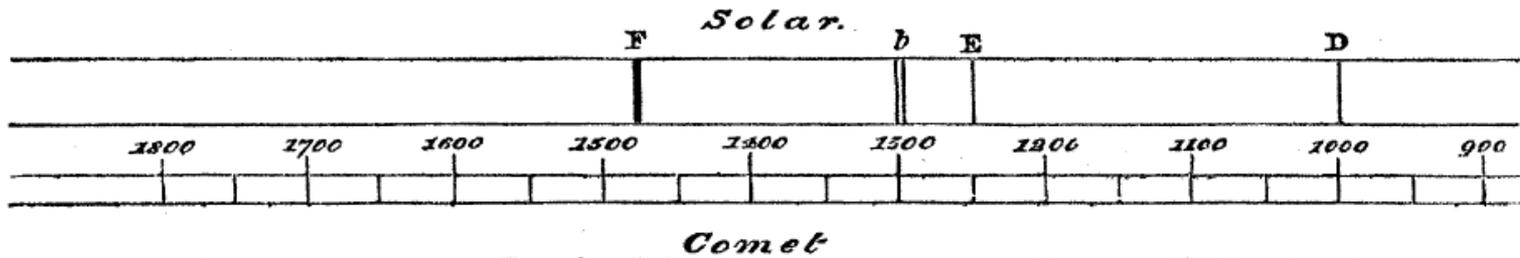
# С благодарностью коллегам...

- Б. Шустову, В. Шематовичу, Д. Семёнову, А. Васюнину, О. Кочиной, С. Каленскому, М. Мурге, М. Кирсановой, Я. Павлюченкову, В. Акимкину, Т. Лозинской, О. Егорову, Т. Моляровой, А. Соболеву, К. Смирновой и многим другим

# 13.7 миллиарда лет назад произошёл Большой Взрыв...



# Первые внеземные молекулы



# Молекулы в межзвёздной среде

...The important conclusion is that a number of common elements H, O, N, etc., will be entirely un-ionised in the cloud.

Ionised atoms repel one another and have no chance of forming molecules. I write about molecules with great diffidence, having not yet rid myself of the tradition that “**atoms are physics, but molecules are chemistry**”; but the new conclusion seems to make it likely that the above-mentioned elements will frequently form molecules. Also there is no obstacle to molecular combination of an ionised atom with a neutral atom. The molecules will be almost always in the ground state; and some of the principal combinations will be permanent, since they require a dissociation energy greater than 13.5 volts. Presumably therefore **a considerable part of the cloud is now in molecular form.**

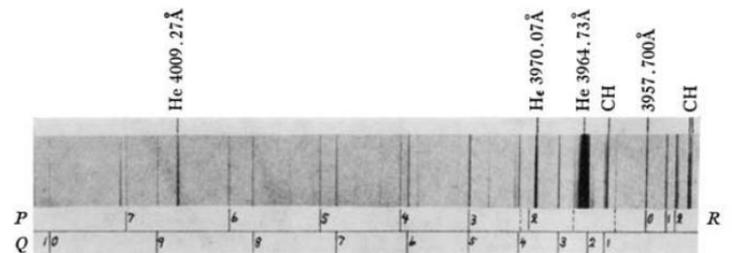
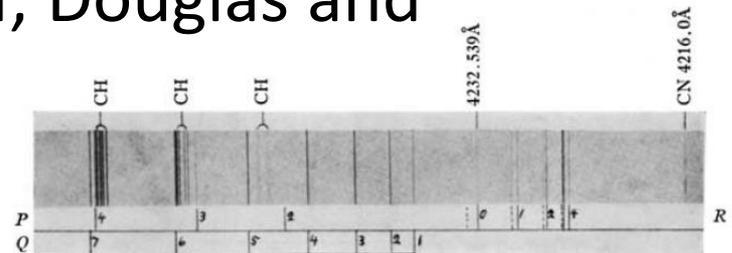
Eddington (1937)

Ионизирующее излучение ( $\lambda < 912\text{\AA}$ ) отсутствует в большей части МЗС, если в межзвёздном веществе есть водород

# Молекулы в межзвёздной среде

- Merrill (1934): диффузные межзвёздные ПОЛОСЫ
  - Saha (1937):  $\text{Na}_2$ , NaK; Swings (1937):  $\text{CO}_2$
- Dunham (1937) + Adams:  $\lambda$  3934.3Å,  $\lambda$  3957.7Å,  $\lambda$  4232.6Å,  $\lambda$  4300.3Å
  - McKellar (1940): **CH**, **CN**, NaH; Douglas and Herzberg (1941): **CH<sup>+</sup>**

Первая конференция по межзвёздным молекулам — июнь 1941 года (Йеркская обсерватория, США)

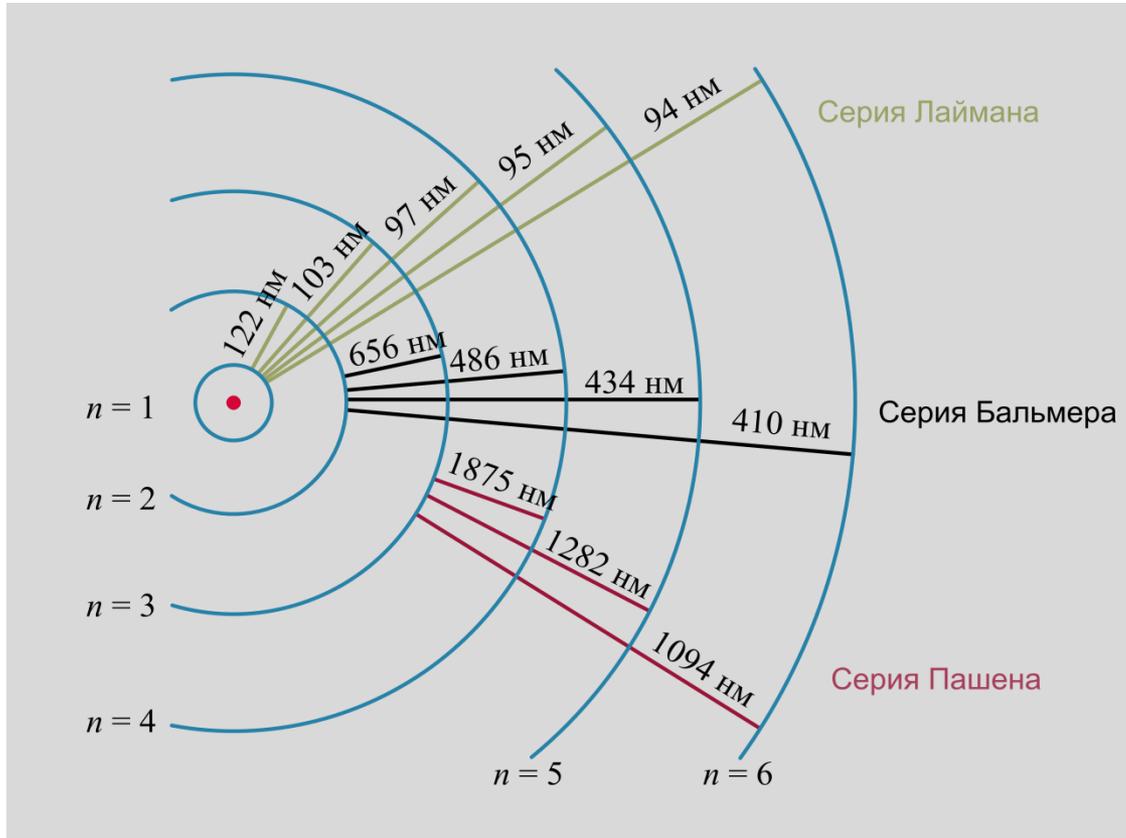


# Межзвёздные линии излучения

The image shows a complex, multi-colored astronomical scene, likely a nebula or star-forming region. The colors range from deep red to bright yellow and white, indicating different temperatures and ionization states of the gas. Overlaid on this scene are several irregular, semi-transparent polygons in various colors (blue, orange, yellow, white). These polygons appear to delineate specific regions or features within the emission lines. A small white crosshair is visible near the center of the image, marking a specific point of interest.

Otto Struve & Christian Elvey (1938) —  
протяжённые области ионизованного водорода,  $H/Ca=100$

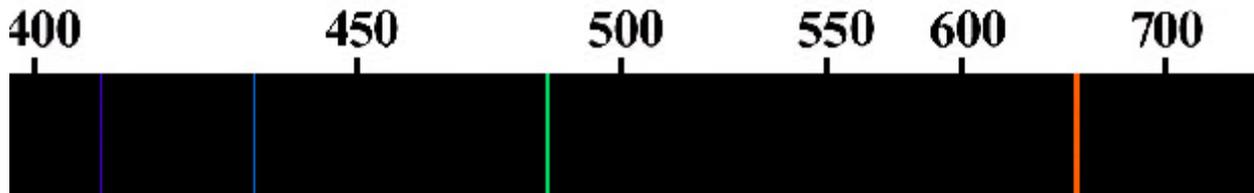
# Рекомбинационные линии излучения



Линия	Длина волны, Å	Интенсивность
H $\alpha$	6563	2.87
H $\beta$	4861	1.00
H $\gamma$	4340	0.466
H $\delta$	4101	0.256
H $\epsilon$	3970	0.159

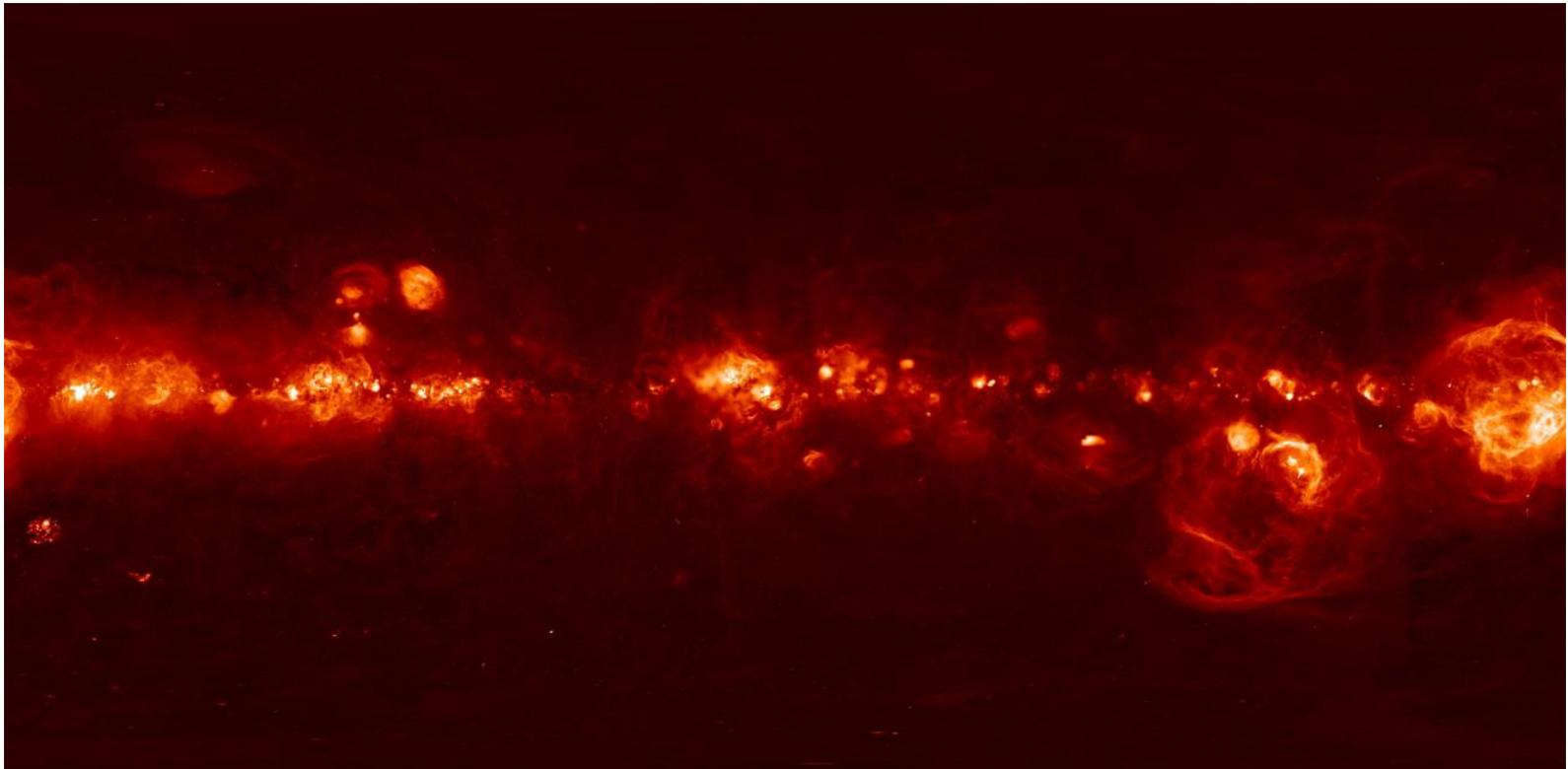
Osterbrock & Ferland (2006)

## Бальмеровская серия водорода



# Ионизованный водород

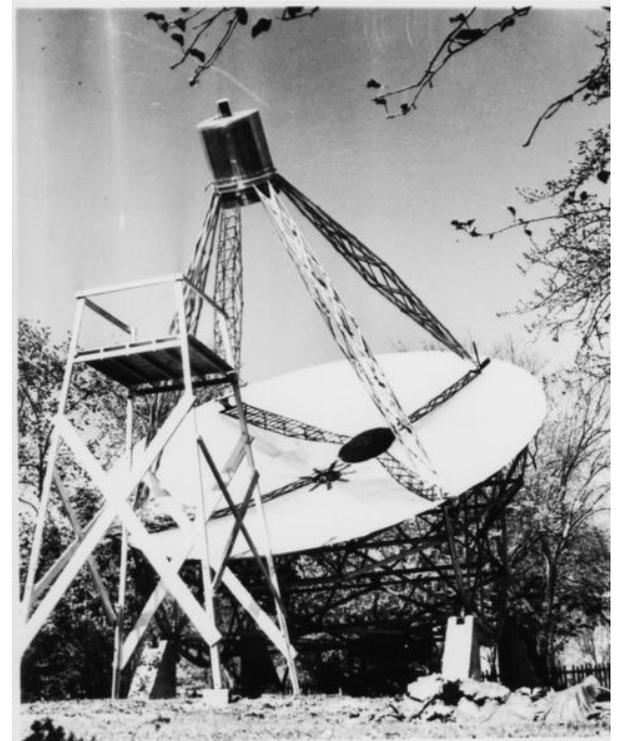
- Strömgren (1939) — физическое состояние межзвёздного водорода



# Радиоастрономия

- Янский (1933)
- Ребер (1940)

«Карусель» Янского



# Излучение нейтрального водорода

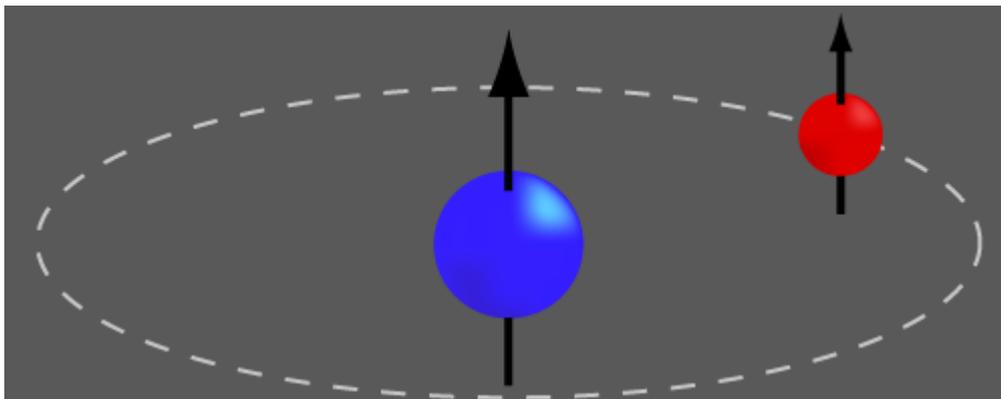
- Хендрик ван де Хулст (1945)
- И.С. Шкловский (1949)

$$\frac{n=1, {}^2S}{J=1/2} \quad \frac{F=1}{F=0} \quad \updownarrow$$

## Водород может существовать в формах, ненаблюдаемых в оптическом диапазоне

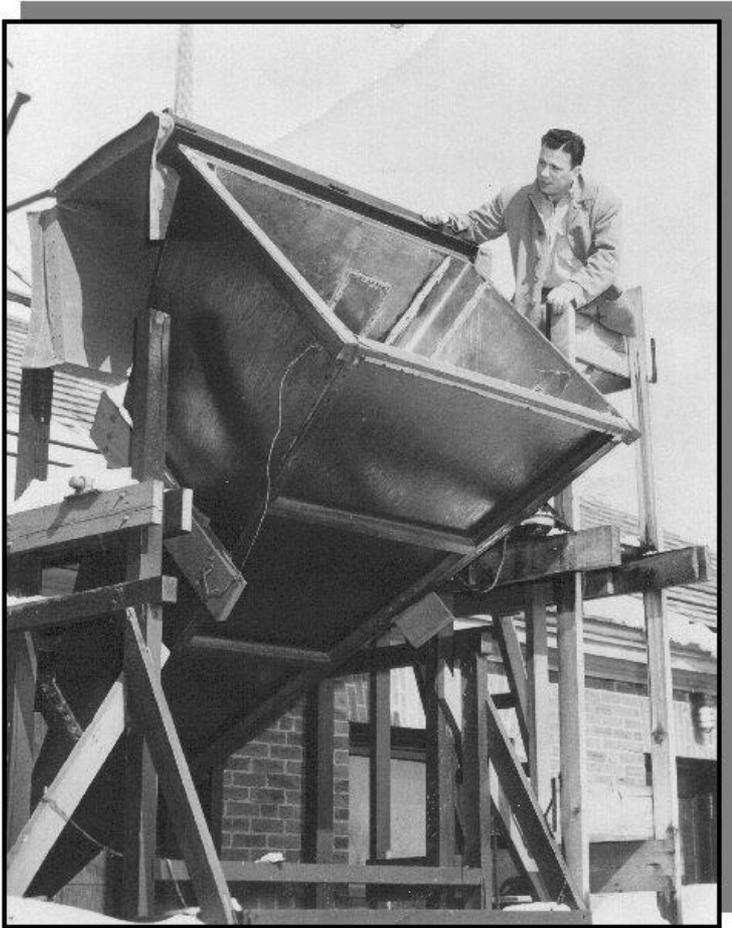
Perhaps as an introduction I may mention one moment that belongs to the pre-history of the investigations of this line. In the spring of 1944 Oort said to me: 'We should have a colloquium on the paper by Reber; would you like to study it? And, by the way, radio astronomy can really become very important if there were at least one line in the radio spectrum. Then we can use the method of differential galactic rotation as we do in optical astronomy.'

Van de Hulst (1957)



# Обнаружение нейтрального водорода

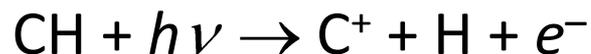
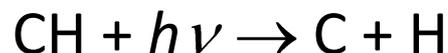
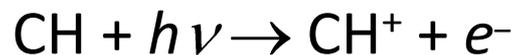
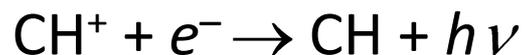
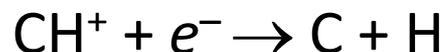
- Юэн, Парселл (1951, HI 21 см) — не менее 5% массы Галактического диска



Гарольд Юэн, 2001

# Происхождение межзвёздных молекул

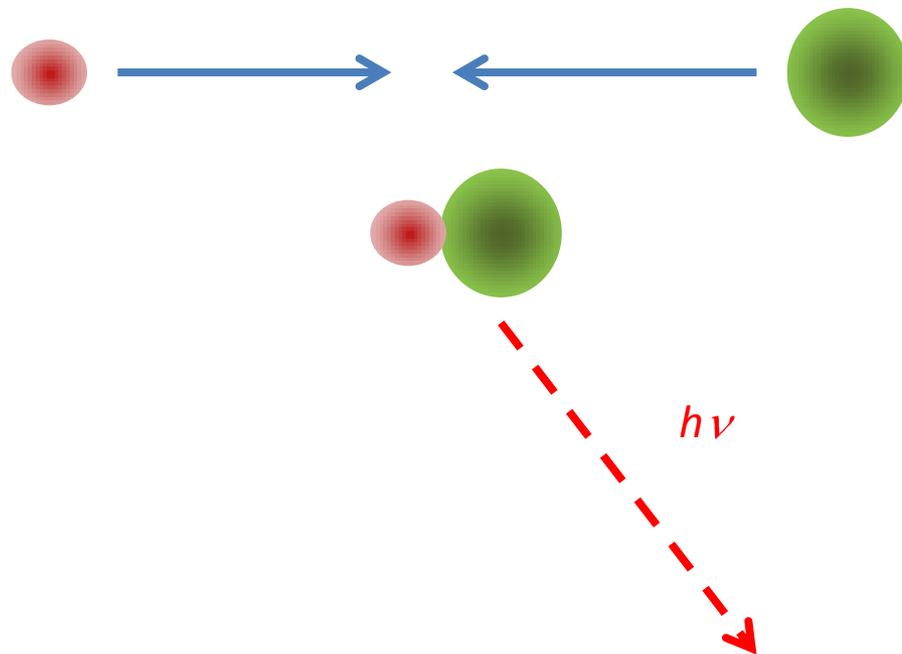
- Радиативная ассоциация (радиационный захват)
- Фотодиссоциация метана, испаряющегося с пылинки



ter Haar (1943)

Kramers & ter Haar (1946)

**Bates and Spitzer (1951)**



# Происхождение межзвёздных молекул

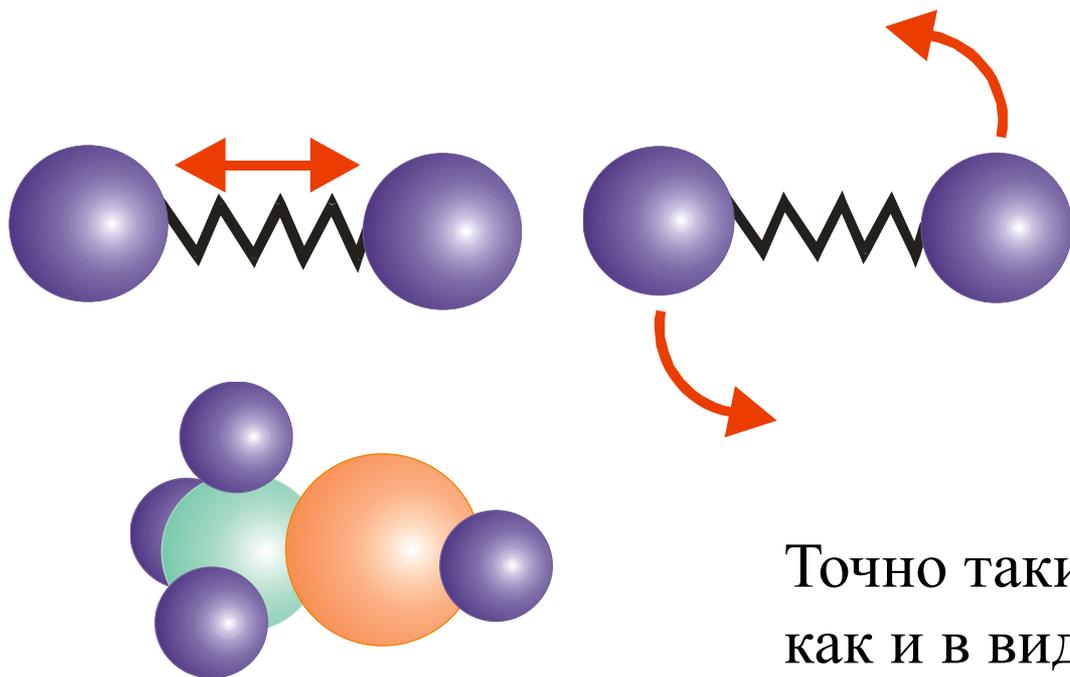
- Радиативная ассоциация
- Синтез молекул на поверхностях пылинок
- Фотодиссоциация сложных молекул, испаряющихся с пылинок
- Истечение звёздного вещества



# Наблюдения молекул в других диапазонах

Колебательные переходы (ИК, поглощение и излучение)

Вращательные переходы (радио, субмм, излучение)



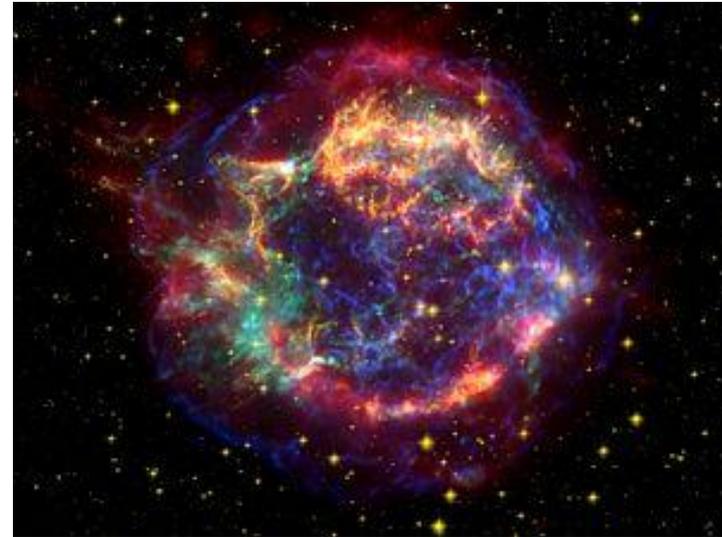
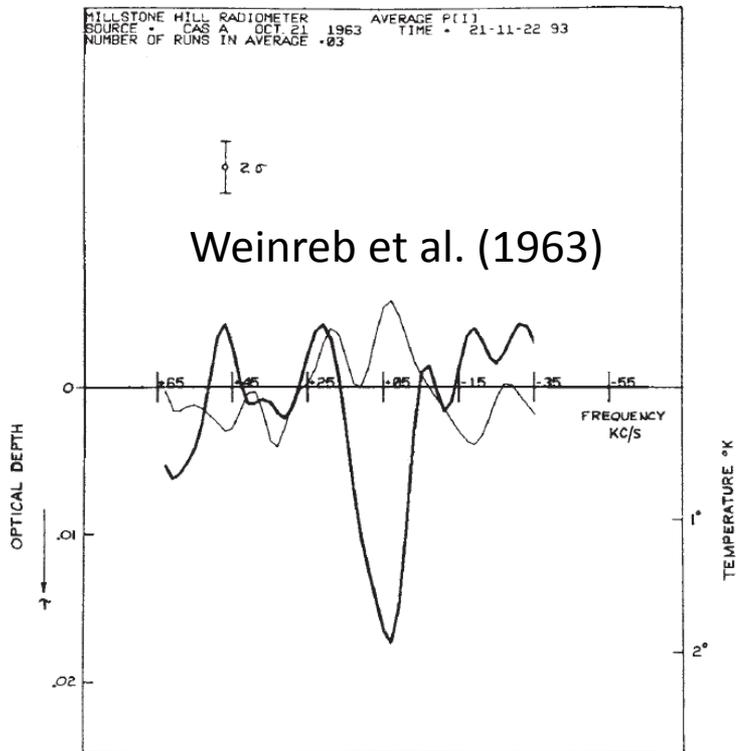
**Первым на возможность наблюдения молекул в радиодиапазоне указал И.С. Шкловский**



Точно такие же спектральные линии, как и в видимом диапазоне.

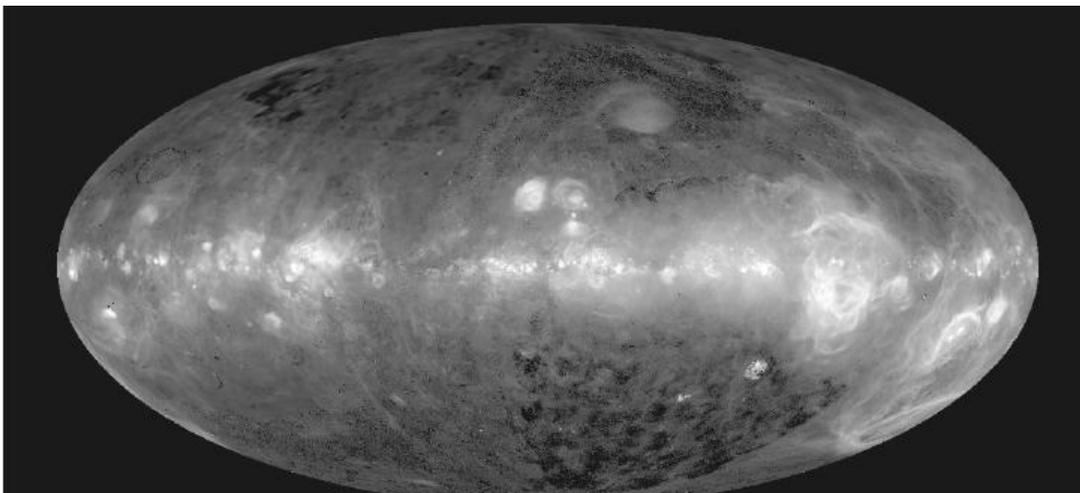
# Новые наблюдения межзвёздных молекул

- OH (1963, поглощение), NH<sub>3</sub> (1968), H<sub>2</sub>O (1969), H<sub>2</sub>CO (1969)
- 1970 — **CO**, H<sub>2</sub>, HCO<sup>+</sup>, CH<sub>3</sub>OH
- 1971 — HCN, HC<sub>3</sub>N, HCOOH, CH<sub>3</sub>CN, NH<sub>2</sub>CHO, CS, OCS, SiO

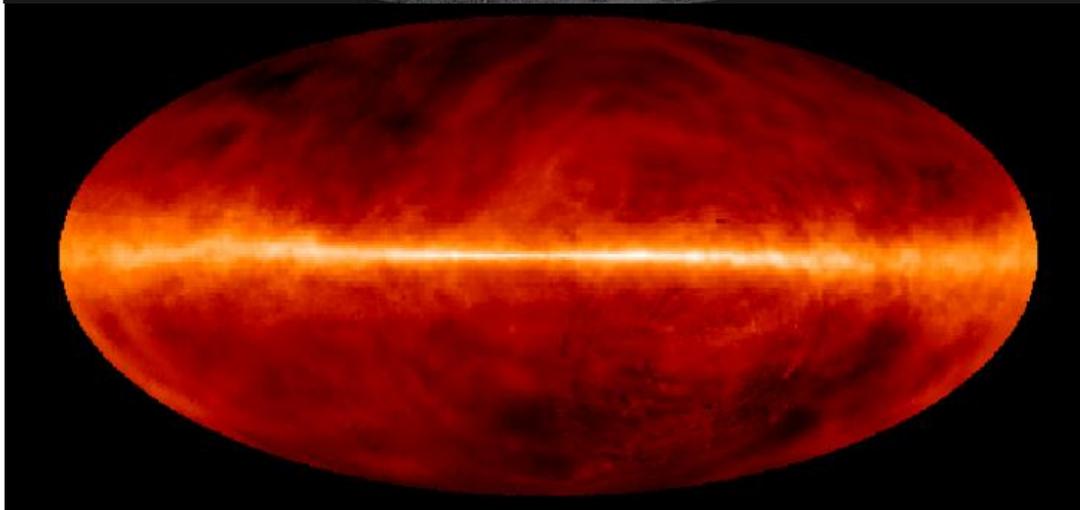


Bortolot & Thaddeus (1969)  
“Probable Detection of Interstellar C<sup>13</sup>H<sup>+</sup>”

H $\alpha$



H I



Поглощение  
пыли



# Основной ингредиент — молекулярный водород

- Излучение нейтрального водорода не коррелирует с пылью

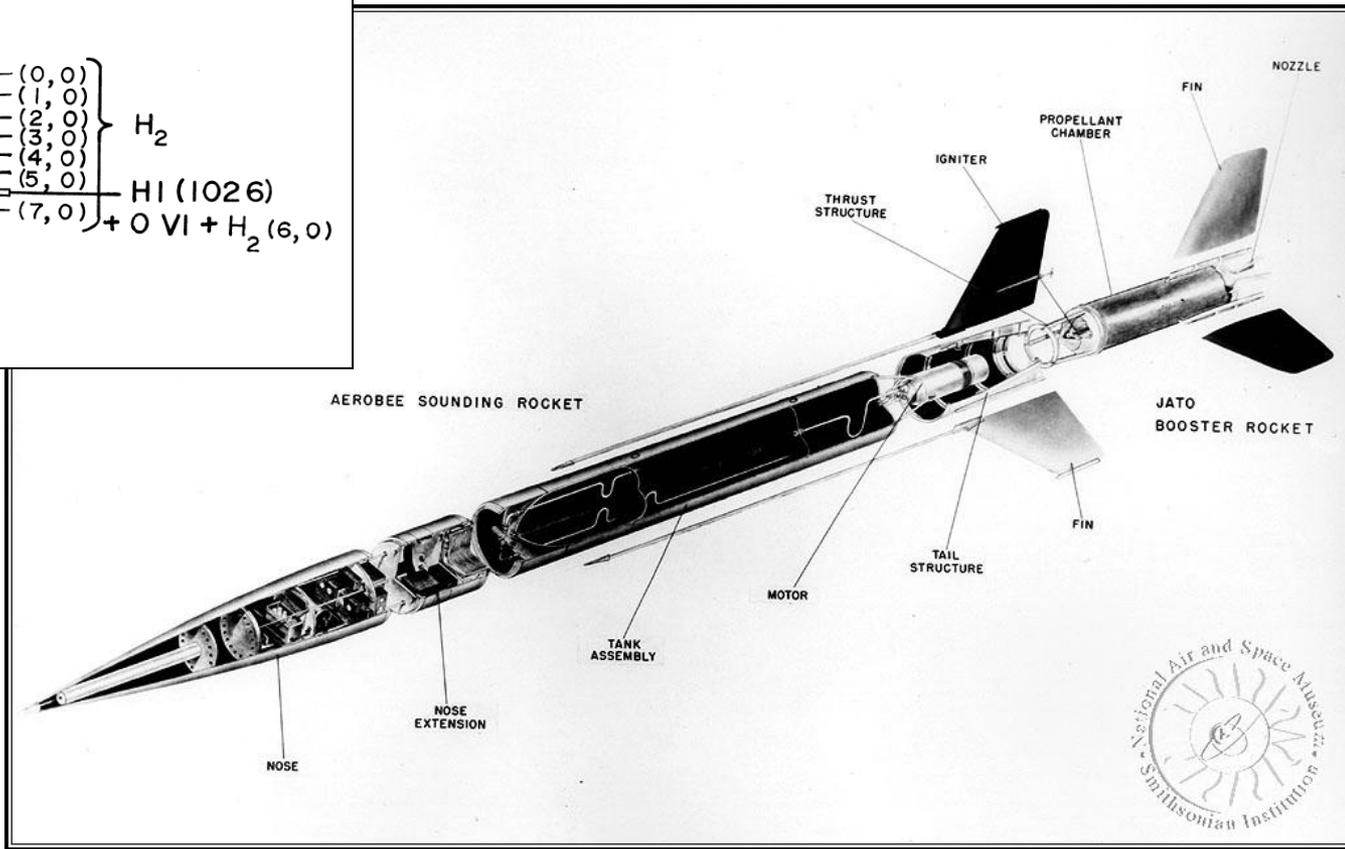
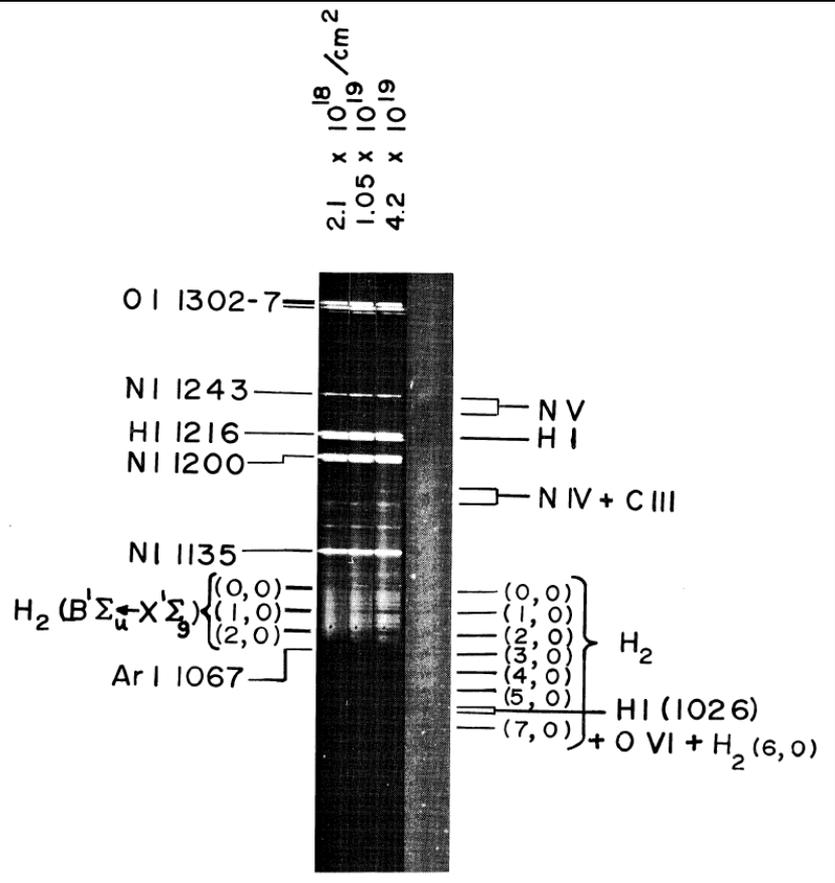
RADIO OBSERVATIONS (21-CM) OF DENSE DARK NEBULAE\* 1955

BART J. BOK, ROBERT S. LAWRENCE,<sup>†</sup> AND T. K. MENON

There remains the possibility that the neutral hydrogen in the dark centers is mostly in molecular form and, hence, that we shall not observe any increases in  $N_H$  or  $\tau_0$ , even though hydrogen may be present in constant proportion to the dust.

# Молекулярный водород

Carruthers (1970)



# Поиски других трейсеров

- Оксид углерода — 1970

## CARBON MONOXIDE IN THE ORION NEBULA

R. W. WILSON, K. B. JEFFERTS, AND A. A. PENZIAS

Bell Telephone Laboratories, Inc., Holmdel, New Jersey, and  
Crawford Hill Laboratory, Murray Hill, New Jersey

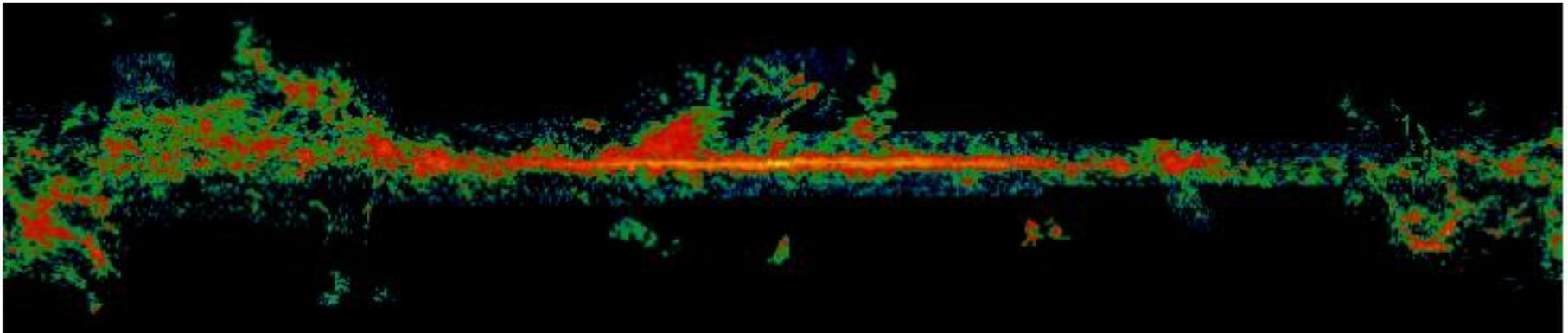
*Received 1970 June 5*

### ABSTRACT

We have found intense 2.6-mm line radiation from nine galactic sources which we attribute to carbon monoxide.

# Молекулярные облака

- Состоят из молекулярного водорода
- Имеют низкие температуры и высокие плотности
- Непроницаемы для ультрафиолетового излучения



# Наблюдения межзвёздных молекул в радиодиапазоне

- OH (1963, поглощение), NH<sub>3</sub> (1968), H<sub>2</sub>O (1969), H<sub>2</sub>CO (1969) — сантиметровый диапазон
- 1970 — четыре молекулы (миллиметровый диапазон), 1971 — восемь молекул...
- 2010 — девять молекул (субмиллиметровый диапазон), 2011 — четыре молекулы (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, SH<sup>+</sup>, FeCN, O<sub>2</sub>), 2012 — четыре молекулы (HO<sub>2</sub>, HCl<sup>+</sup>, SH, trans-HCOOCH<sub>3</sub>), 2013 — CH<sub>3</sub>CHNH, e-HNCHCN, CH<sub>3</sub>COOCH<sub>3</sub>, HMgNC, H<sub>2</sub>NCO<sup>+</sup>, ArH<sup>+</sup>, 2014 — (NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CO, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>SH, C<sub>5</sub>S, MgCCH, NCCP, NO<sup>+</sup>, CCN, SiH<sub>3</sub>CN, 2015 — CH<sub>3</sub>NCO, NCCNH<sup>+</sup>, SiCSi, HCCO, 2016 — CH<sub>3</sub>CHCH<sub>2</sub>O

# Список известных межзвёздных и околозвёздных молекул

(<http://astrochymist.org/>)

Молекулы из двух атомов

AlF AlCl C<sub>2</sub> CH CH<sup>+</sup> CN **CO** CO<sup>+</sup> CP CS SiC HCl **H<sub>2</sub>** KCl NH NO NS NaCl OH PN SO SO<sup>+</sup> SiN SiO SiS **HF** SH SH<sup>+</sup> O<sub>2</sub>  
HCl<sup>+</sup> OH<sup>+</sup> CN<sup>-</sup> AlO HCl<sup>+</sup> NO<sup>+</sup>

Молекулы из трех атомов

C<sub>3</sub> C<sub>2</sub>H C<sub>2</sub>O C<sub>2</sub>S CH<sub>2</sub> HCN HCO HCO<sup>+</sup> HCS<sup>+</sup> HOC<sup>+</sup> **H<sub>2</sub>O** H<sub>2</sub>S HNC HNO MgCN MgNC N<sub>2</sub>H<sup>+</sup> N<sub>2</sub>O NaCN OCS SO<sub>2</sub>  
c-SiC<sub>2</sub> CO<sub>2</sub> NH<sub>2</sub> **H<sub>3</sub><sup>+</sup>** SiCN FeCN KCN H<sub>2</sub>Cl<sup>+</sup> H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> AlOH HO<sub>2</sub> SiCSi

Молекулы из четырех атомов

c-C<sub>3</sub>H I-C<sub>3</sub>H C<sub>3</sub>N C<sub>3</sub>O C<sub>3</sub>S C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> HCCN HCNH<sup>+</sup> HNCO HNCS HOCO<sup>+</sup> H<sub>2</sub>CO H<sub>2</sub>CN H<sub>2</sub>CS H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> **NH<sub>3</sub>** SiC<sub>3</sub> H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> HSCN  
PH<sub>3</sub> I-C<sub>3</sub>H<sup>+</sup> NCCP MgCCH HCCO

Молекулы из пяти атомов

C<sub>5</sub> C<sub>4</sub>H C<sub>4</sub>Si I-C<sub>3</sub>H<sub>2</sub> c-C<sub>3</sub>H<sub>2</sub> CH<sub>2</sub>CN **CH<sub>4</sub>** HC<sub>3</sub>N HC<sub>2</sub>NC HCOOH H<sub>2</sub>CHN H<sub>2</sub>C<sub>2</sub>O H<sub>2</sub>NCN HNC<sub>3</sub> SiH<sub>4</sub> H<sub>2</sub>COH<sup>+</sup> CH<sub>3</sub>O  
HNCNH NCCNH<sup>+</sup>

Молекулы из шести атомов

C<sub>5</sub>H C<sub>5</sub>O C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> CH<sub>3</sub>CN CH<sub>3</sub>NC **CH<sub>3</sub>OH** CH<sub>3</sub>SH HC<sub>3</sub>NH<sup>+</sup> HC<sub>2</sub>CHO HCONH<sub>2</sub> I-H<sub>2</sub>C<sub>4</sub> C<sub>5</sub>N C<sub>5</sub>N<sup>-</sup> E-HNCHCN C<sub>5</sub>S SiH<sub>3</sub>CN

Молекулы из семи атомов

C<sub>6</sub>H CH<sub>2</sub>CHCN CH<sub>3</sub>C<sub>2</sub>H HC<sub>5</sub>N HCOCH<sub>3</sub> NH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub> c-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O CH<sub>2</sub>CHOH C<sub>7</sub><sup>-</sup>(?) CH<sub>3</sub>NCO

Молекулы из восьми атомов

CH<sub>3</sub>C<sub>3</sub>N HCOOCH<sub>3</sub> CH<sub>3</sub>COOH C<sub>7</sub>H H<sub>2</sub>C<sub>6</sub> CH<sub>2</sub>OHCHO **NH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN** CH<sub>3</sub>CHNH

Молекулы из девяти атомов

CH<sub>3</sub>C<sub>4</sub>H CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CN (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>O **CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH** HC<sub>7</sub>N C<sub>8</sub>H

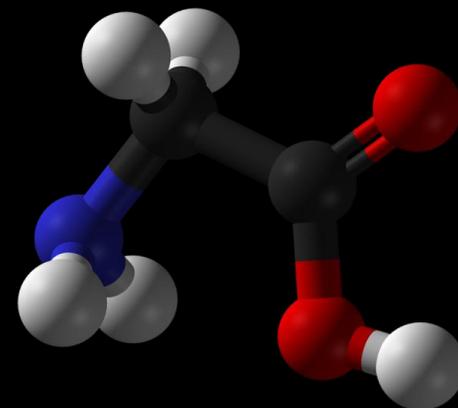
Молекулы из десяти атомов

CH<sub>3</sub>C<sub>5</sub>N? (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO **NH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COOH?** HOCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH **CH<sub>3</sub>CHCH<sub>2</sub>O**

Молекулы из одиннадцати атомов HC<sub>9</sub>N C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OCHO

Молекулы из двенадцати атомов CH<sub>3</sub>OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub> C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>CN

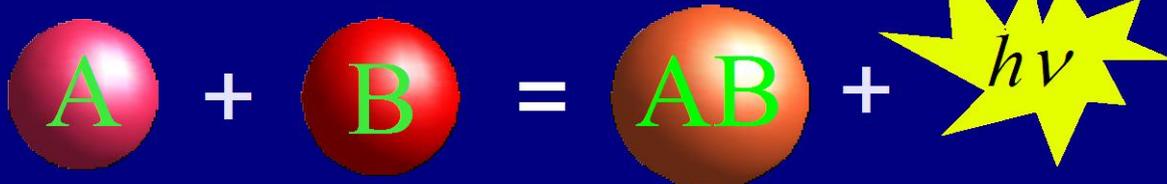
Молекулы из тринадцати атомов **HC<sub>11</sub>N?**



# Реакции между нейтральными компонентами

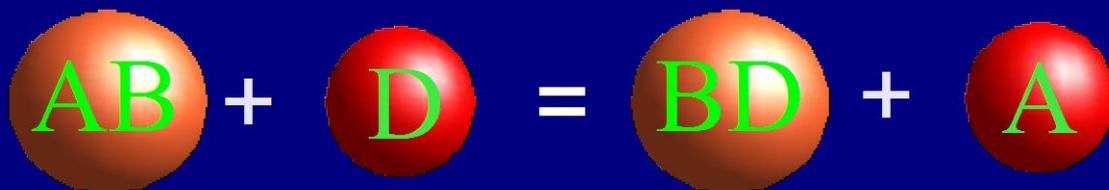
Радиативная ассоциация

Создание химических связей



Барьеры  
Эндотермические  
Низкие скорости

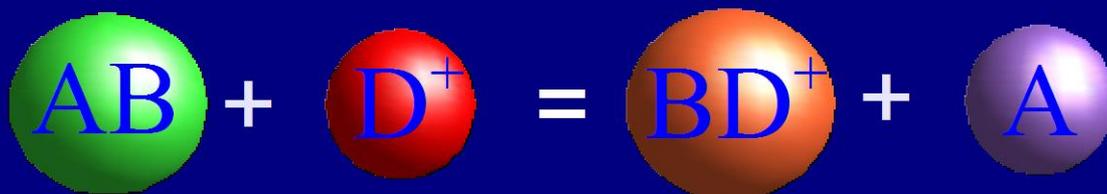
Перераспределение химических связей



Относительно высокие  
скорости

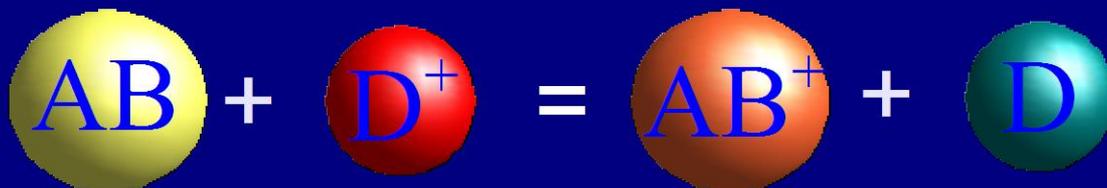
# Реакции между нейтральными и ионизованными компонентами

Перераспределение химических связей



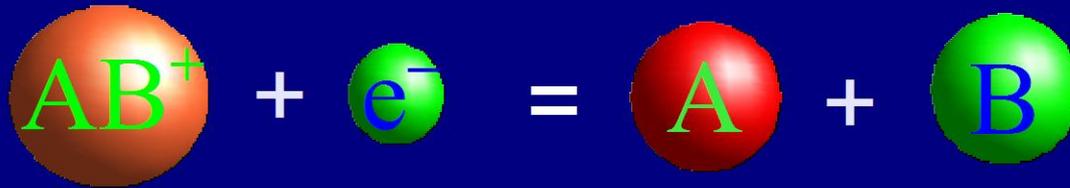
Высокие скорости при низких температурах

Перезарядка



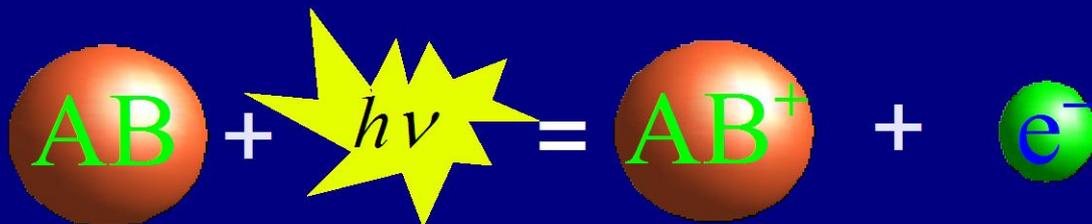
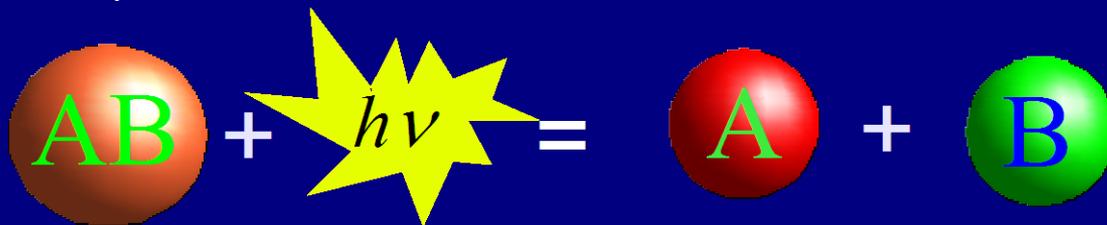
# Реакции диссоциативной рекомбинации

Разрыв химических связей



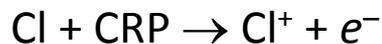
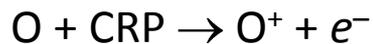
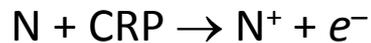
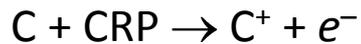
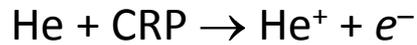
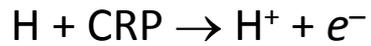
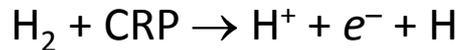
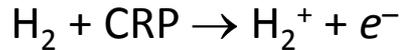
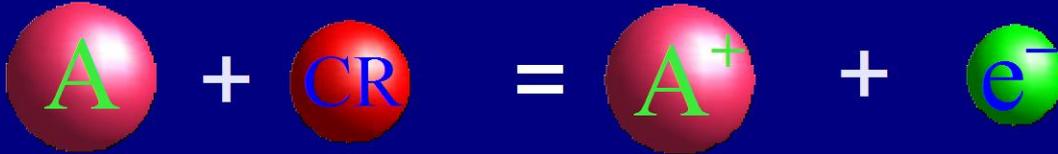
# Фотореакции

Разрыв химических связей



# Реакции с космическими лучами

## Реакции ионизации



$$r = \alpha \zeta n_i$$

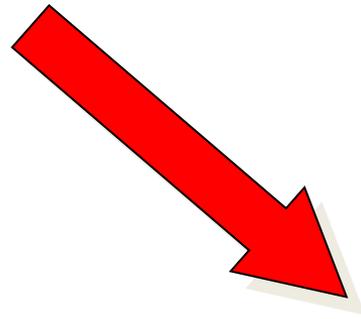
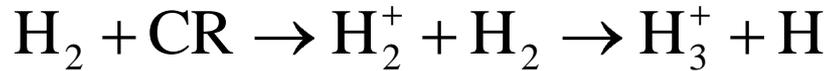
$$\zeta_{\text{CR}} = 1.3 \cdot 10^{-17} \text{ c}^{-1}$$

$$\zeta_{\text{RN}} = 6.0 \cdot 10^{-19} \text{ c}^{-1}$$

$$\zeta_{\text{X}} = \sim 10^{-12} \text{ c}^{-1}$$

Инициирование химии и нагрев среды в тёмных облаках

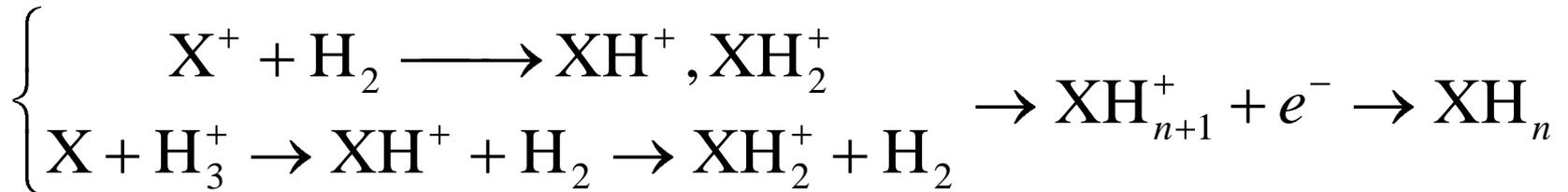
# Ион-молекулярная химия



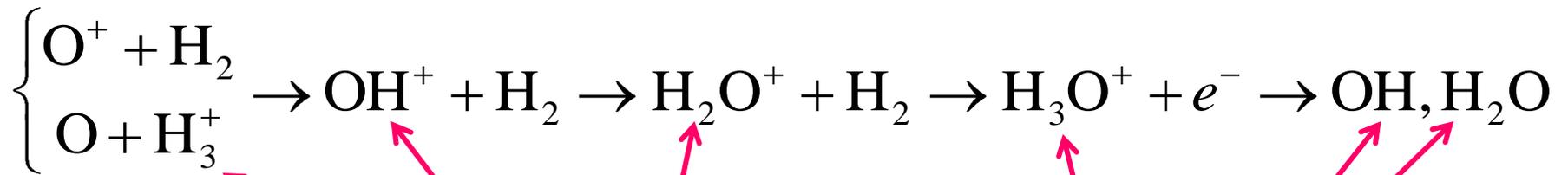
Движущая сила межзвёздной химии — молекулярные ионы, порождённые космическими лучами

Watson (1973)

Herbst & Klemperer (1973)



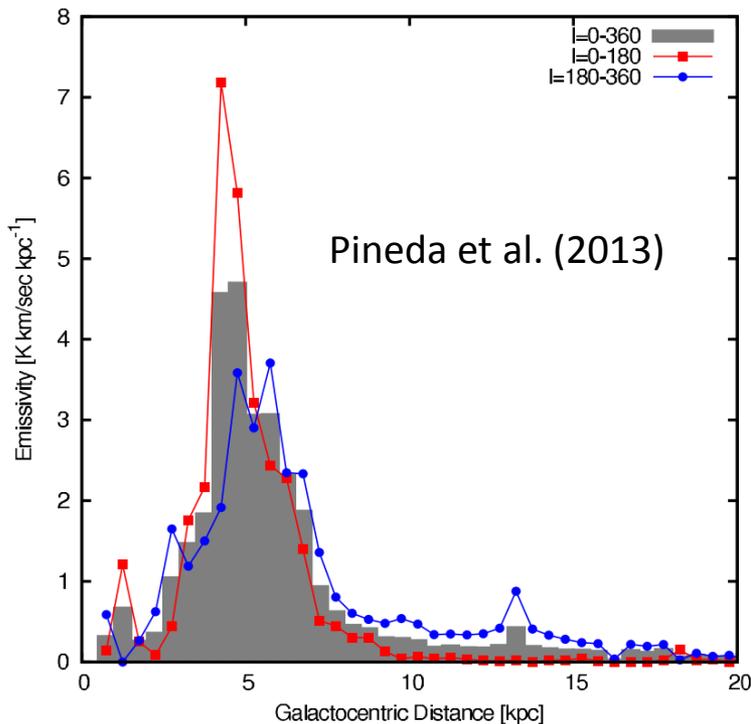
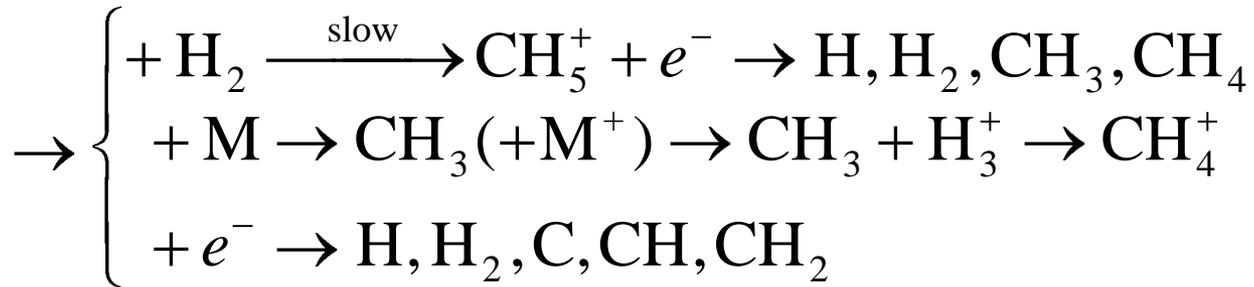
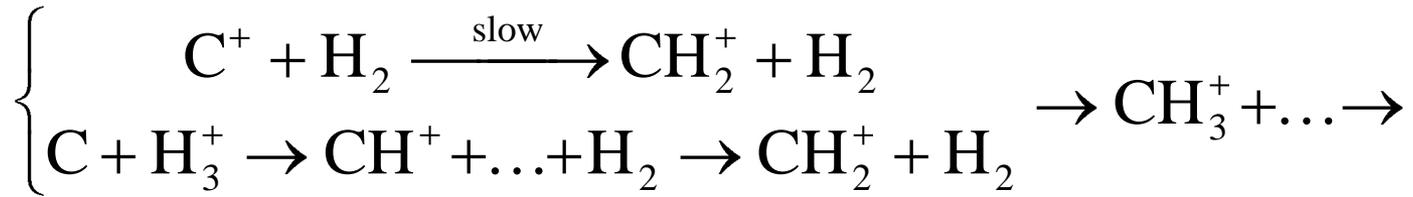
# Основные химические реакции: кислород



**Наблюдаются**

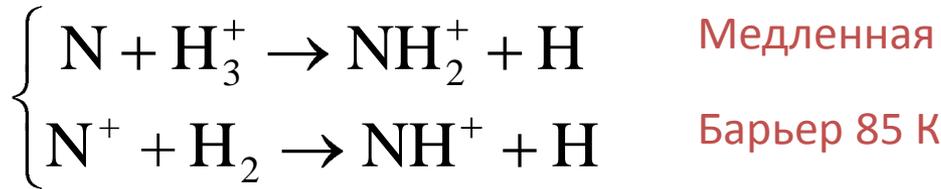


# Основные химические реакции: углерод



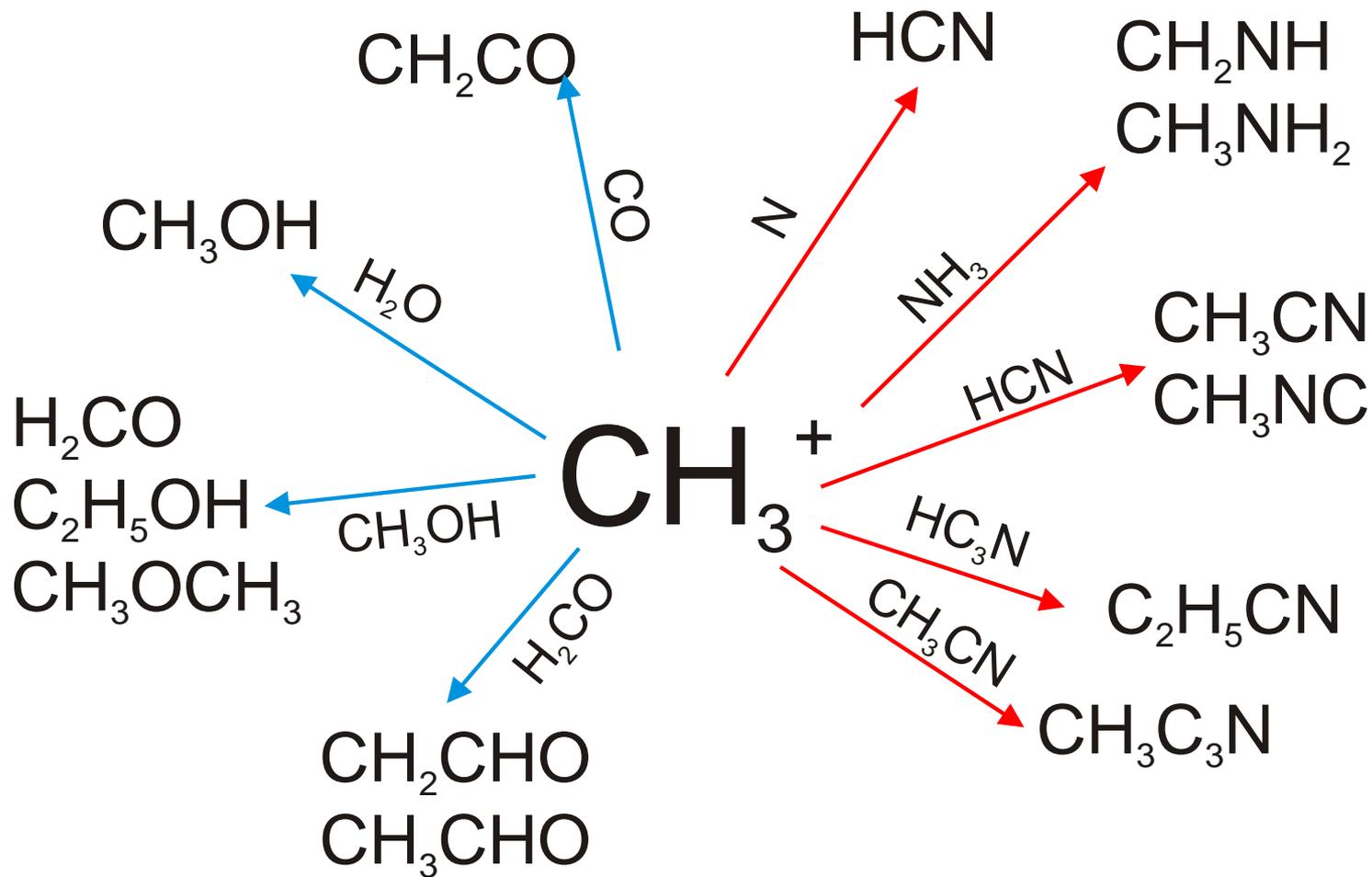
# Основные химические реакции

## Азот

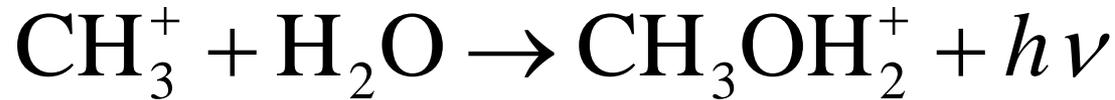


# Последующие реакции

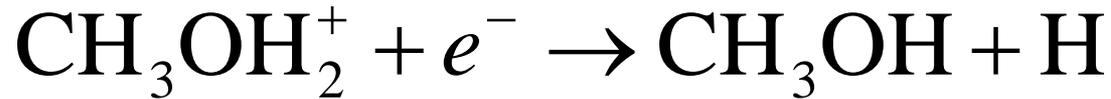
# Синтез более сложных молекул



# Недостаток метанола



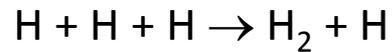
...



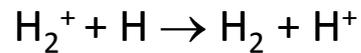
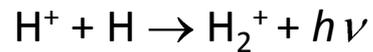
Медленная и лишь в 3% случаев ведёт к образованию метанола

# Молекулярный водород в газовой фазе почти не образуется!

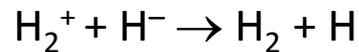
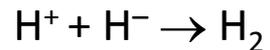
Трехчастичные столкновения:



Очень-очень медленная реакция:



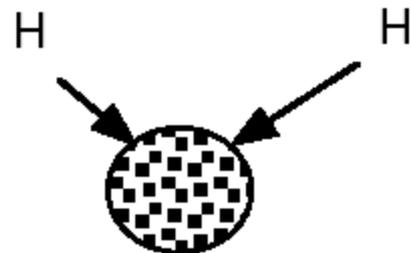
Очень медленная реакция:



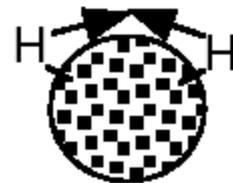
Единственный способ образовать  $\text{H}_2$  в ранней Вселенной

# Образование молекулярного водорода на пыли

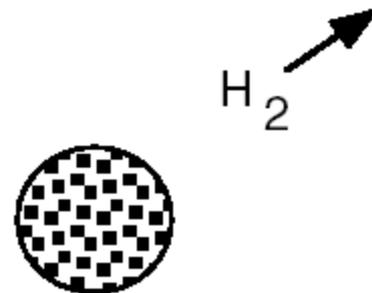
1. Атомы водорода прилипают к пылинке.



2. Перемещаясь по поверхности пылинки, атомы сталкиваются друг с другом и образуют молекулу  $H_2$ .



3. Энергия, выделившаяся при образовании молекулы  $H_2$ , отрывает ее от пылинки.



# Поверхностные реакции с участием CO

## Конечные продукты:

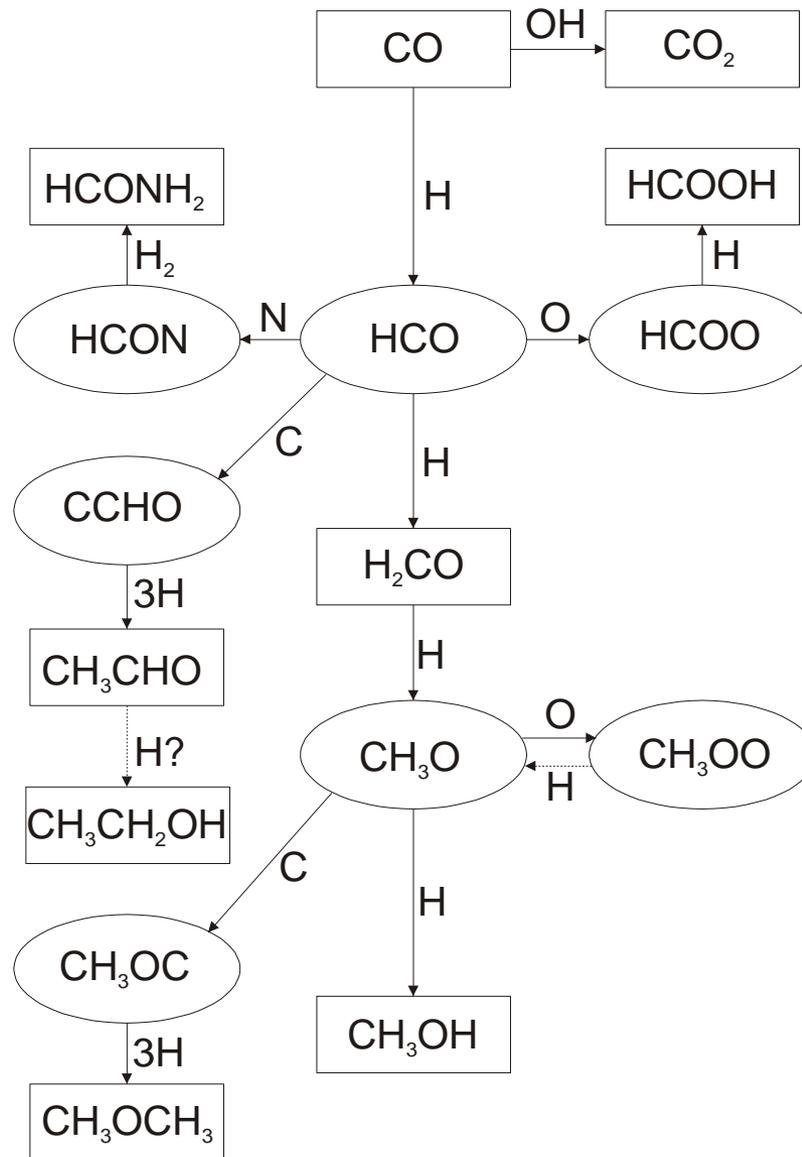
Формальдегид

Метанол

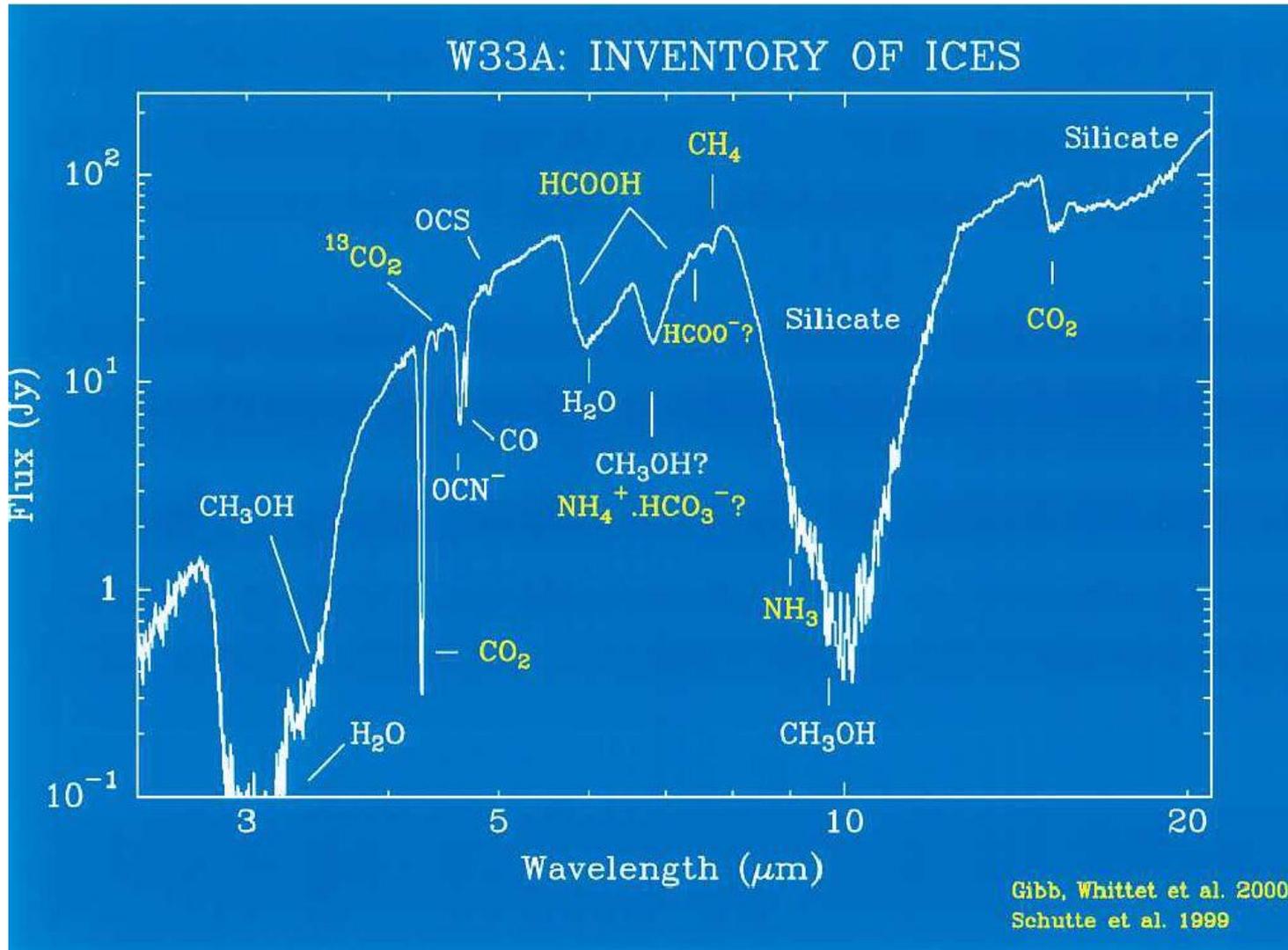
Этанол

Диметилловый эфир

Муравьиная кислота



# Ледяные мантии космических пылинок



# Наблюдения льдов

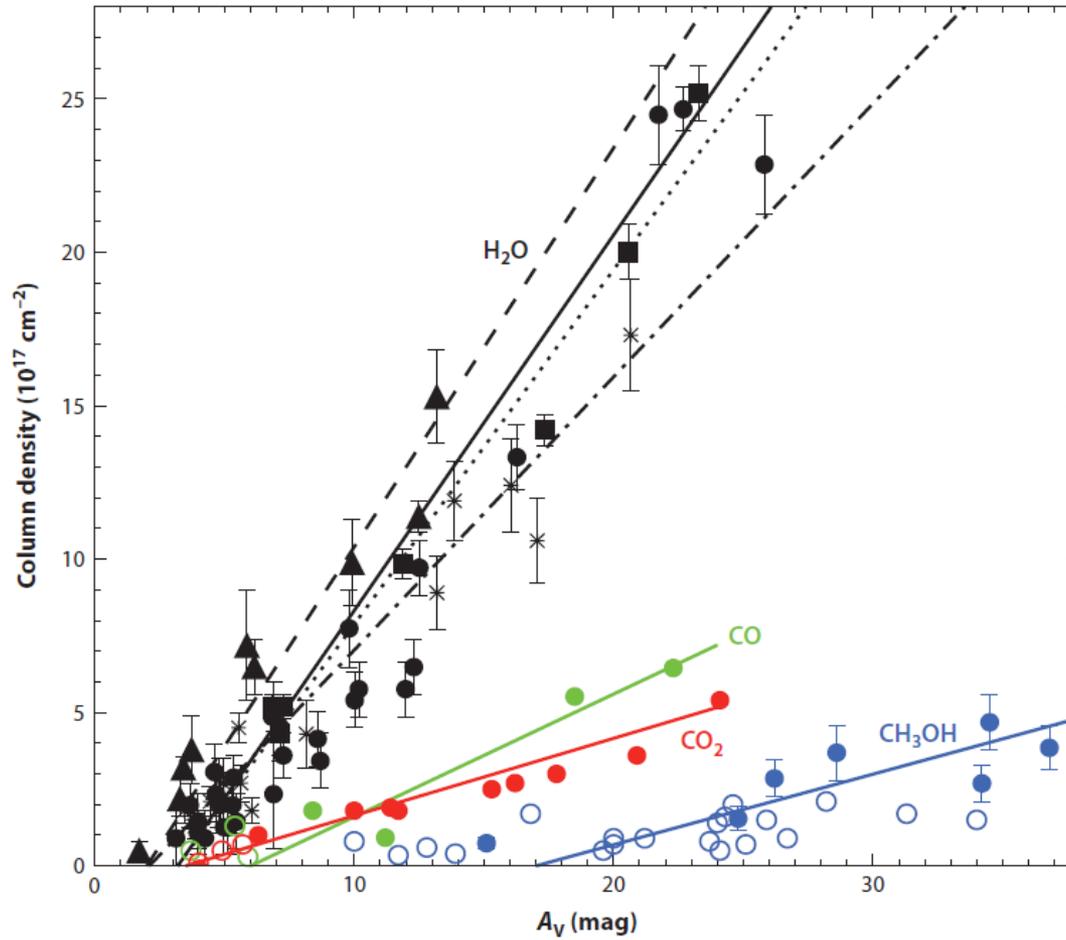
Species	$X_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{a}}$ [%]			
	MYSOs	LYSOs	BG Stars <sup>c</sup>	Comets
Securely identified species: <sup>d</sup>				
H <sub>2</sub> O <sup>e</sup>	100	100	100	100
CO <sup>e</sup>	$7_4^{15}$ (7) 3–26	$21_{12}^{35}$ (18) (<3)–85	$25_{20}^{43}$ 9–67	nd 0.4–30
CO <sub>2</sub> <sup>e</sup>	$19_{12}^{25}$ 11–27	$28_{23}^{37}$ 12–50	$26_{18}^{39}$ 14–43	$15_{10}^{24}$ 4–30
CH <sub>3</sub> OH	$9_5^{23}$ (5) (<3)–31	$6_5^{12}$ (5) (<1)–25	$8_6^{10}$ (6) (<1)–12	nd 0.2–7
NH <sub>3</sub>	nd ~7 <sup>f</sup>	$6_4^8$ (4) 3–10	nd <7	nd 0.2–1.4
CH <sub>4</sub>	nd 1–3	$4.5_3^6$ (3) 1–11	nd <3	nd 0.4–1.6

# Наблюдения льдов

Species	$X_{\text{H}_2\text{O}}^a$ [%]			
	MYSOs	LYSOs	BG Stars <sup>c</sup>	Comets
<b>Likely identified species:<sup>g</sup></b>				
H <sub>2</sub> CO	~2–7	~6	nd	0.11–1.0
OCN <sup>-</sup>	0.6 <sub>0.3</sub> <sup>0.7</sup>	0.6 <sub>0.4</sub> <sup>0.8</sup> (0.4)	nd	nd
	0.1–1.9	(<0.1)–1.1	<0.5	nd
OCS	0.03–0.16	≤1.6	<0.22	0.1–0.4
<b>Possibly identified species:<sup>h</sup></b>				
HCOOH <sup>i</sup>	4 <sub>3</sub> <sup>5</sup> (3)	nd	nd	nd
	(<0.5)–6	(<0.5)–4	<2	0.06–0.14
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH <sup>i</sup>	~ $X_{\text{H}_2\text{O}}$ (HCOOH)	nd	nd	nd
HCOO <sup>-j</sup>	0.5 <sub>0.5</sub> <sup>0.7</sup> (0.5)	nd	nd	nd
	0.3–1.0	~0.4	<0.1	nd
CH <sub>3</sub> CHO <sup>j</sup>	$X_{\text{H}_2\text{O}}$ (HCOO <sup>-</sup> ) × 11	nd	nd	nd
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	11 <sub>9</sub> <sup>13</sup>	11 <sub>7</sub> <sup>15</sup>	8 <sub>6</sub> <sup>11</sup>	nd
	9–34	4–25	4–13	nd
SO <sub>2</sub>	(<0.9)–1.4	~0.2	nd	0.2

Boogert et al. (2015)

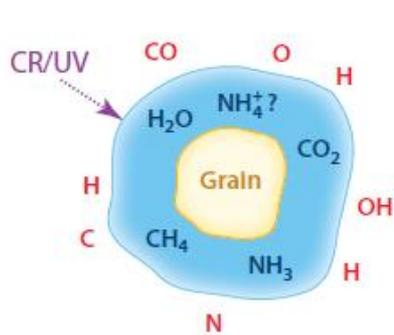
# Наблюдения льдов



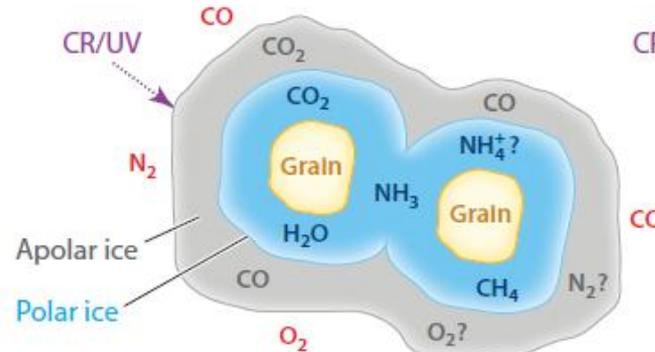
Boogert et al. (2015)

## Grain surface chemistry

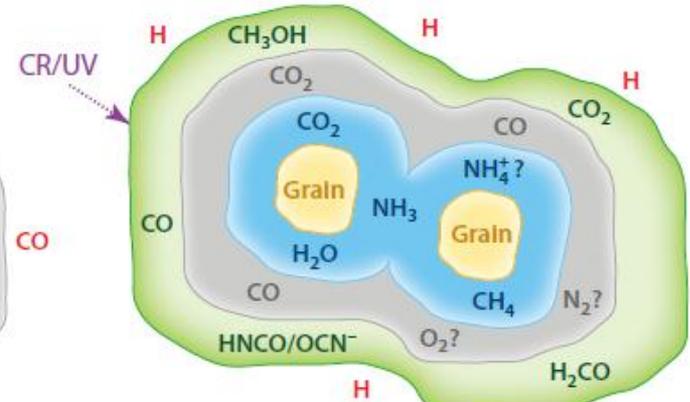
**1 Polar phase:** gas H/CO large,  
 $T > 20 \text{ K}$ ,  $n \geq 10^3 \text{ cm}^{-3}$ ,  $A_V > 1.5$



**2 Apolar phase:** gas H/CO small,  
 $T < 20 \text{ K}$ ,  $n \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ,  $A_V > 3$



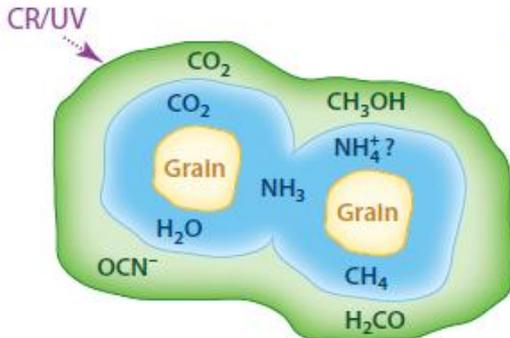
**3 CH3OH phase:** gas H/CO large,  
 $T < 20 \text{ K}$ ,  $n \geq 10^5 \text{ cm}^{-3}$ ,  $A_V > 9$



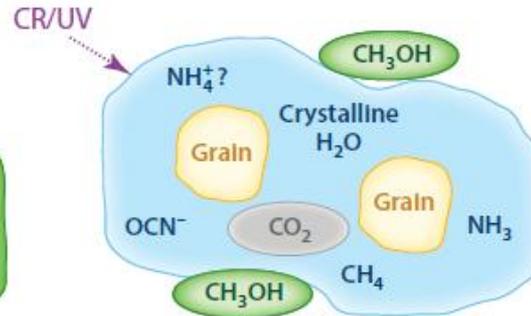
Boogert et al. (2015)

## Thermal processing

**4 Distillation phase:**  
 $T > 20 \text{ K}$

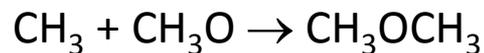
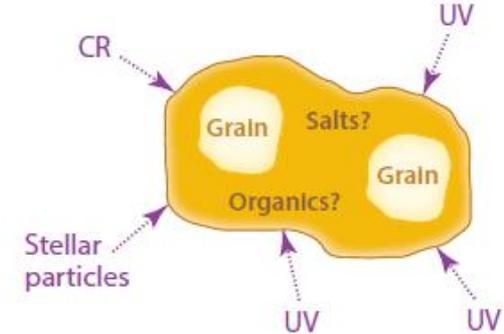


**5 Segregation phase:**  
 $T \sim 30\text{--}77 \text{ K}$



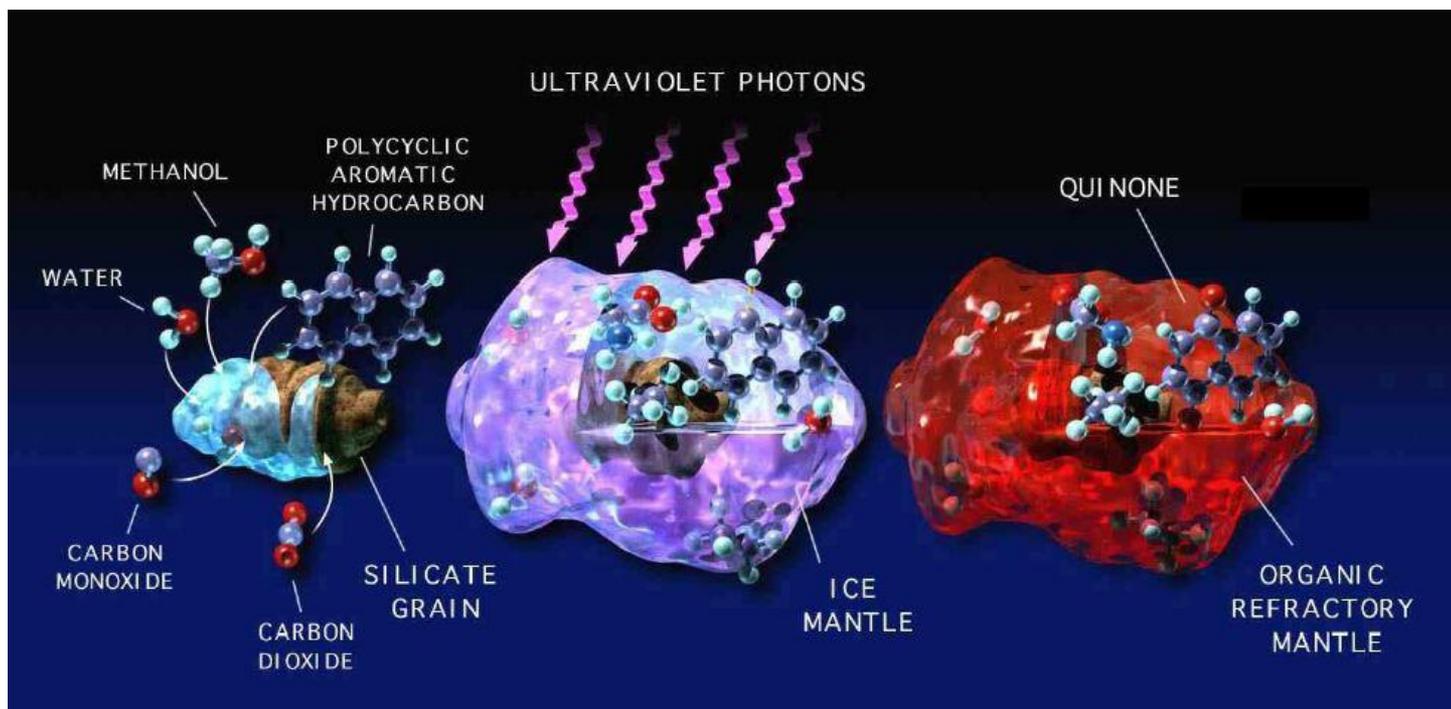
## Energetic processing

**6 Energetic phase:**  
 $T > 90 \text{ K}$ , high UV



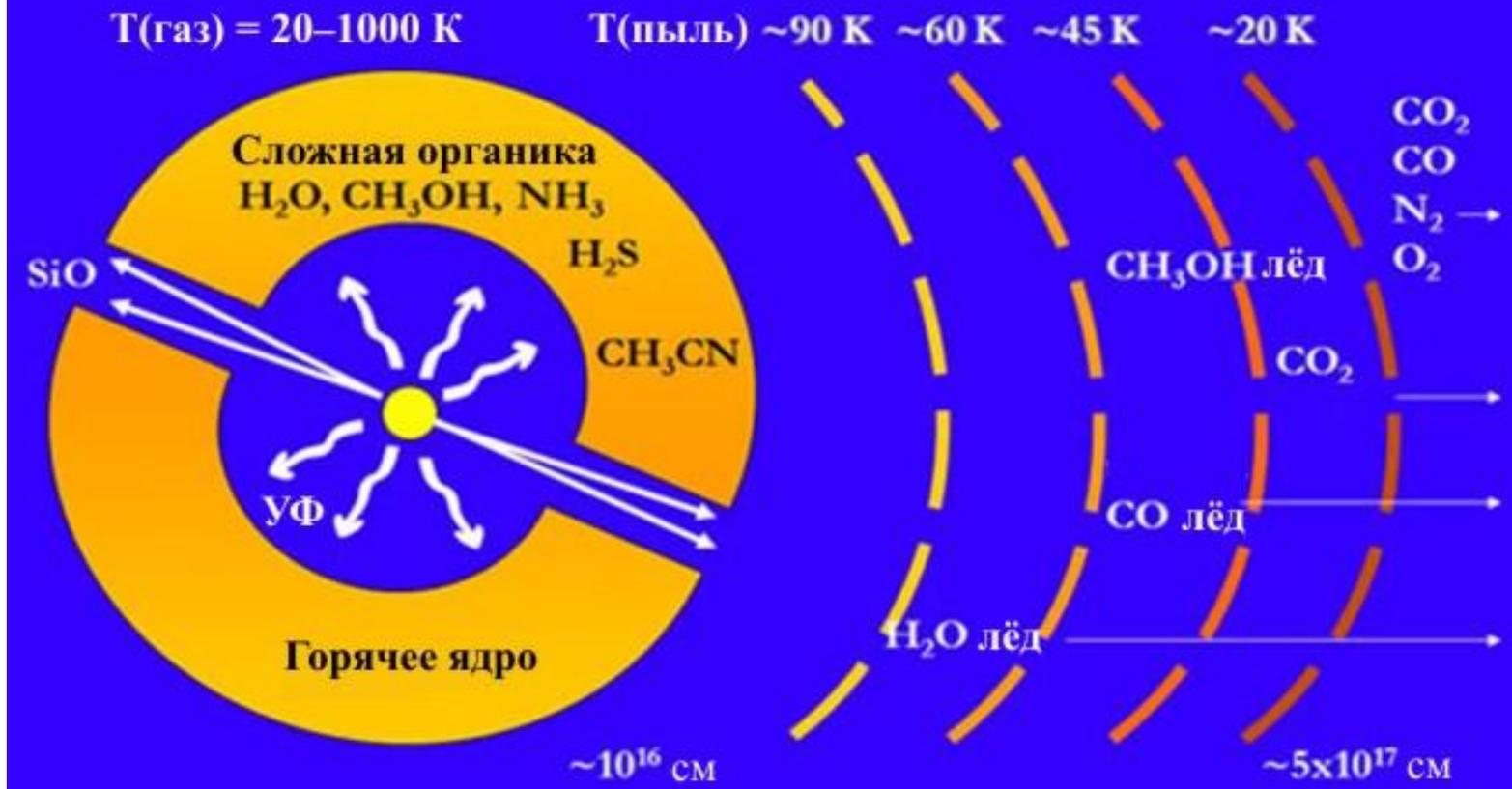
## Десорбция

- Тепловая десорбция (энергия связи)
- Десорбция космическими лучами (температура нагрева)
- Фотодесорбция (вероятность отрыва)
- Химическая десорбция

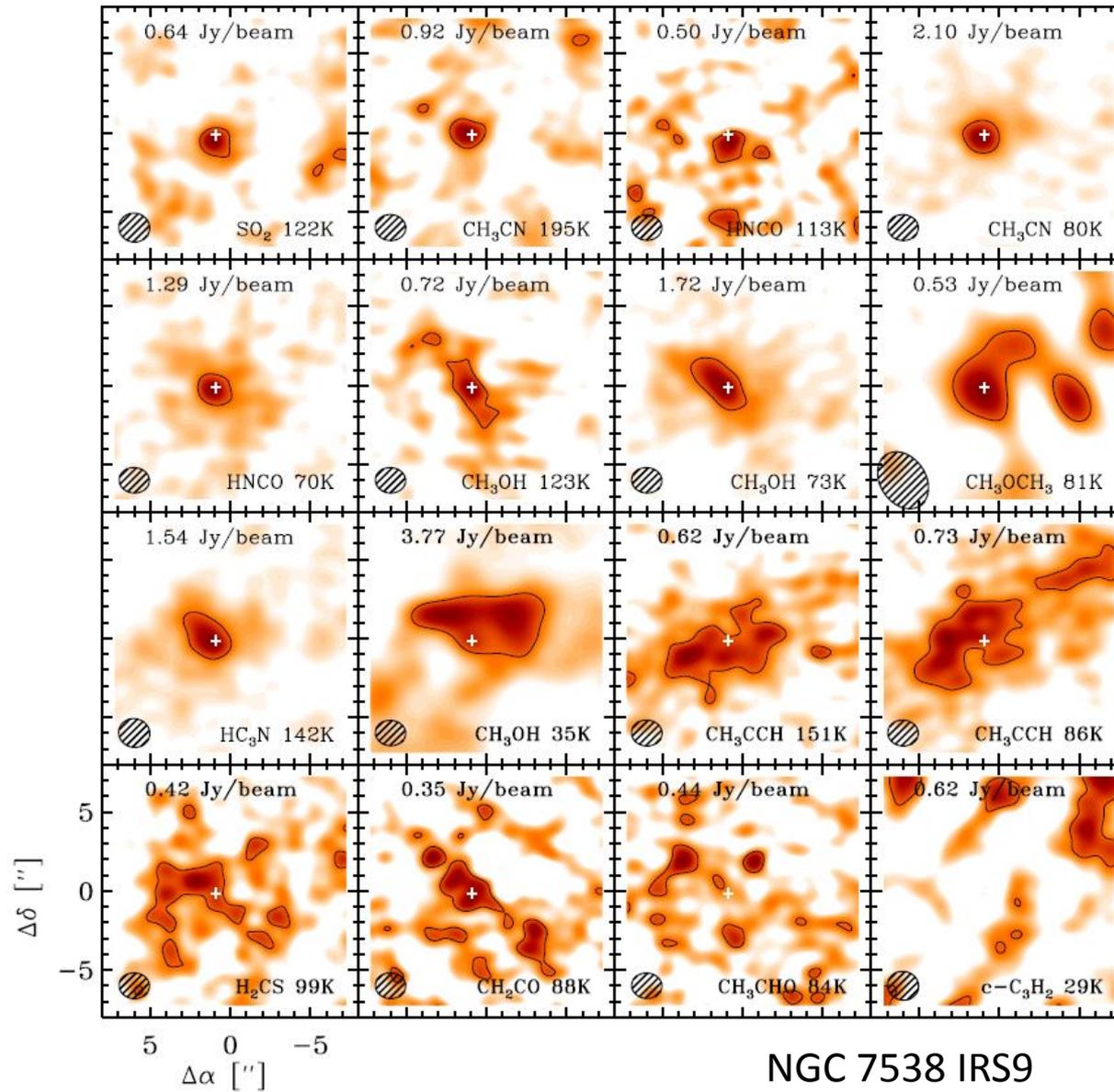


# Горячие ядра

## Схема горячего ядра



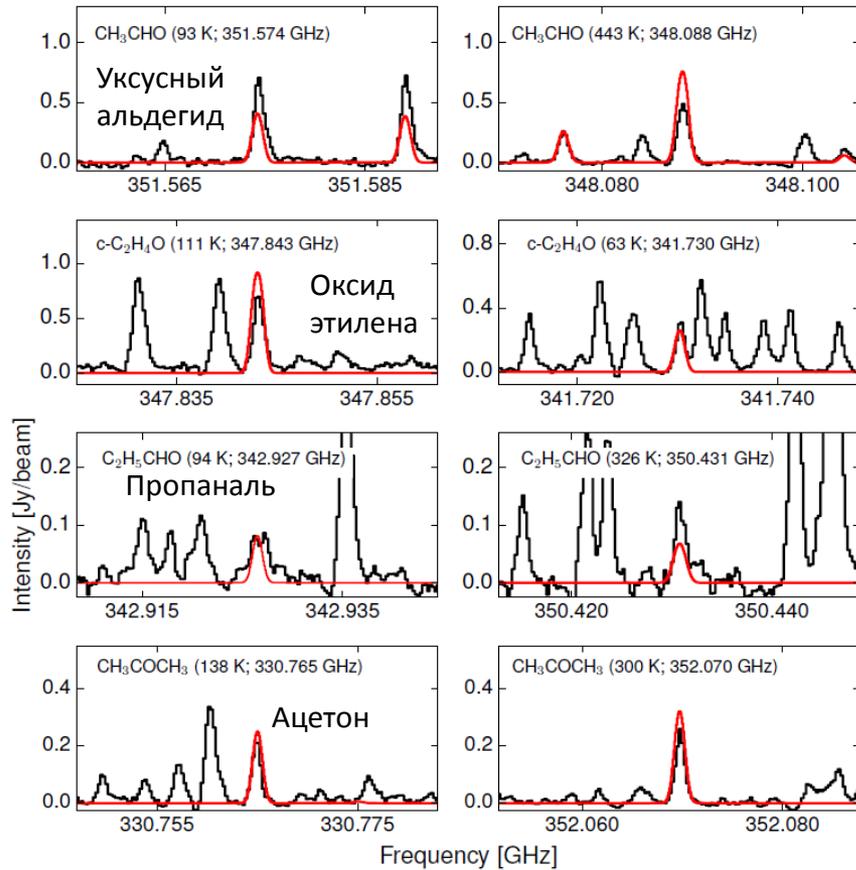
# Горячие ядра



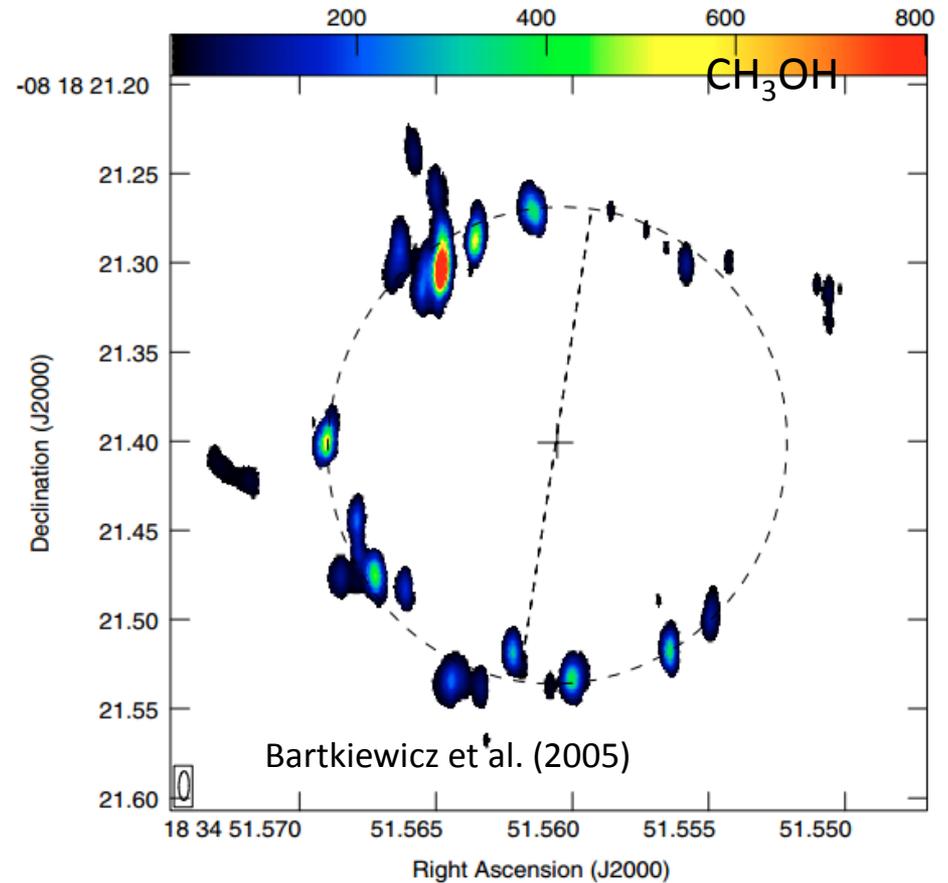
Öberg et al. (2013)

NGC 7538 IRS9

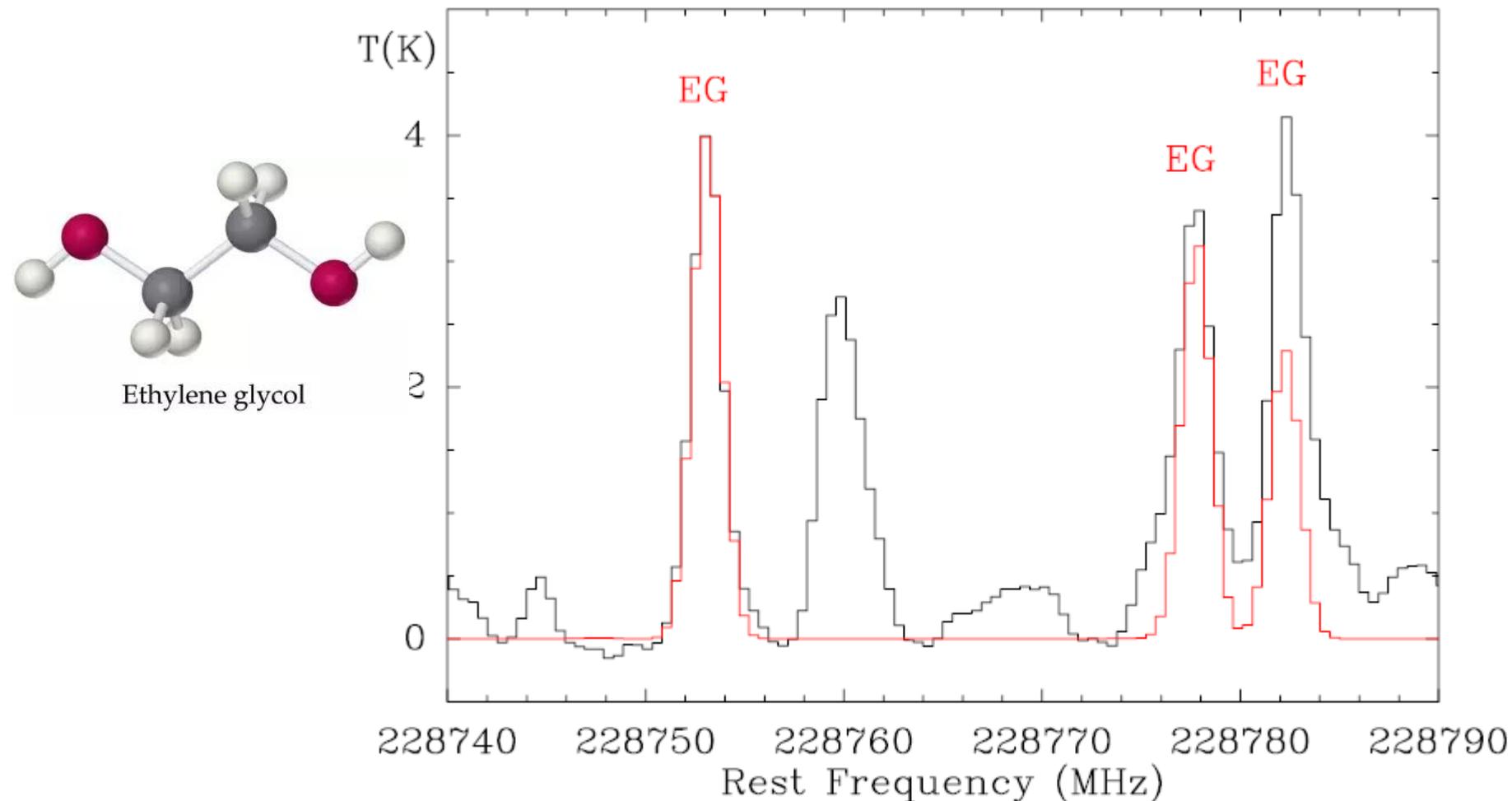
# Горячие ядра (hot cores) и горячие ядрышки (hot corinos)



Lykke et al. (2016)

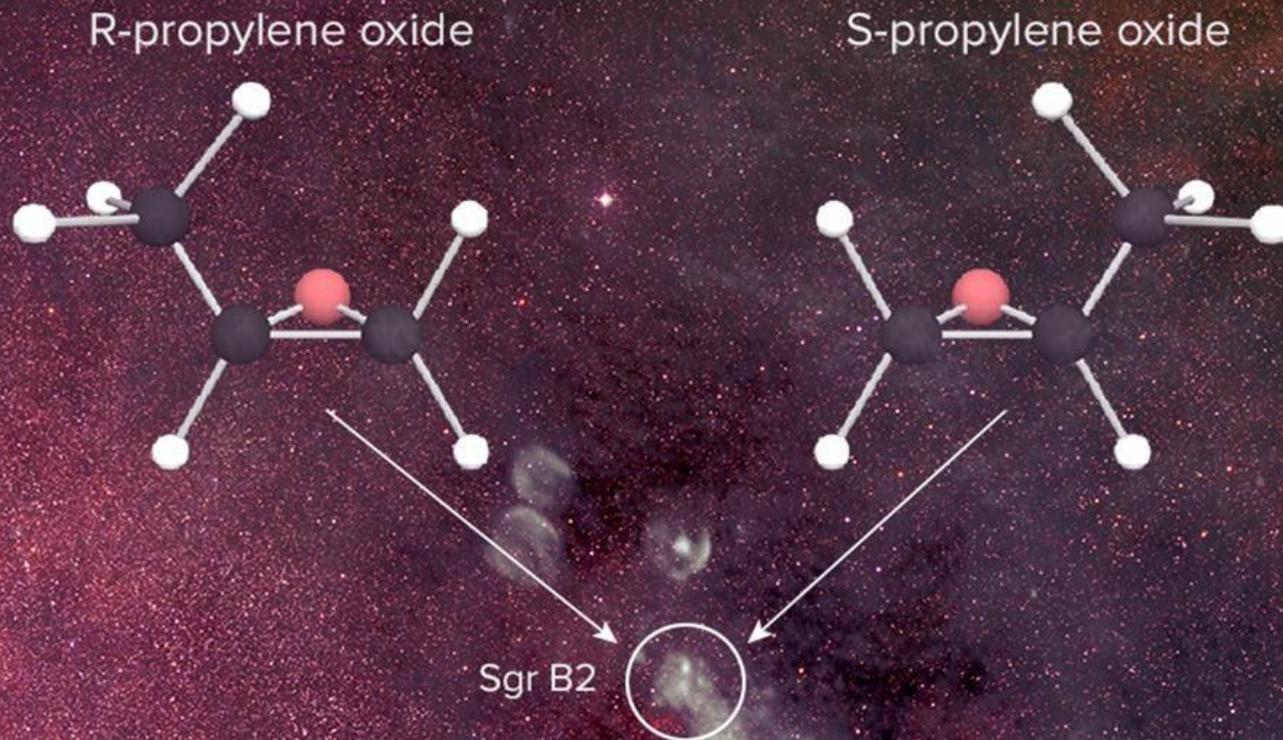


# «Антифриз в горячем ядре»

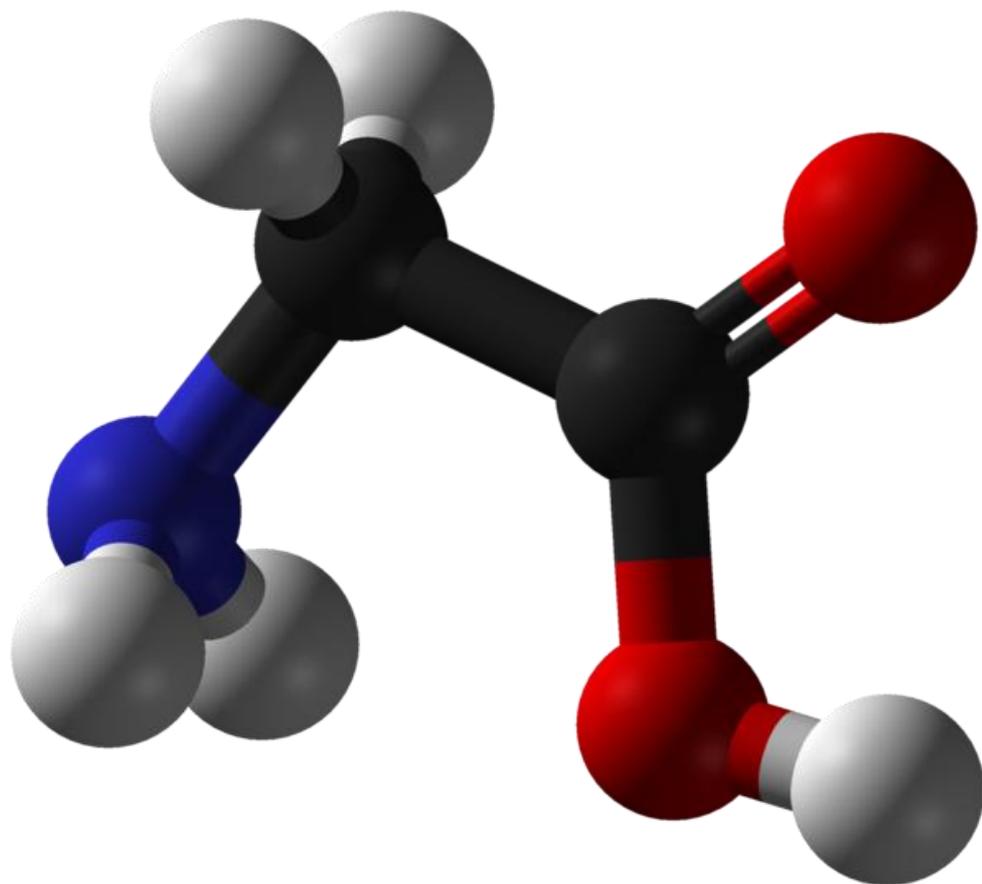


Brouillet et al. (2015)

# Хиральная молекула

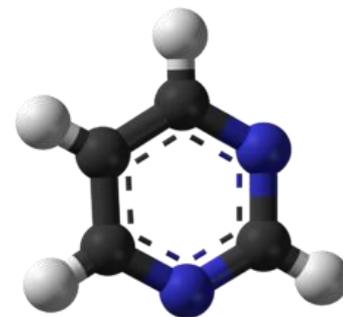


# Аминокислоты?



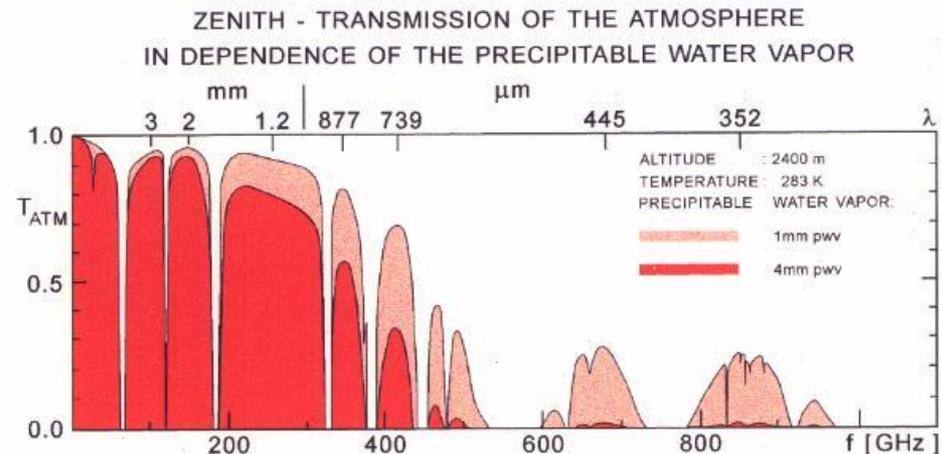
Kuan et al. (2003),  
но Snyder et al. (2005)

Пиримидин?

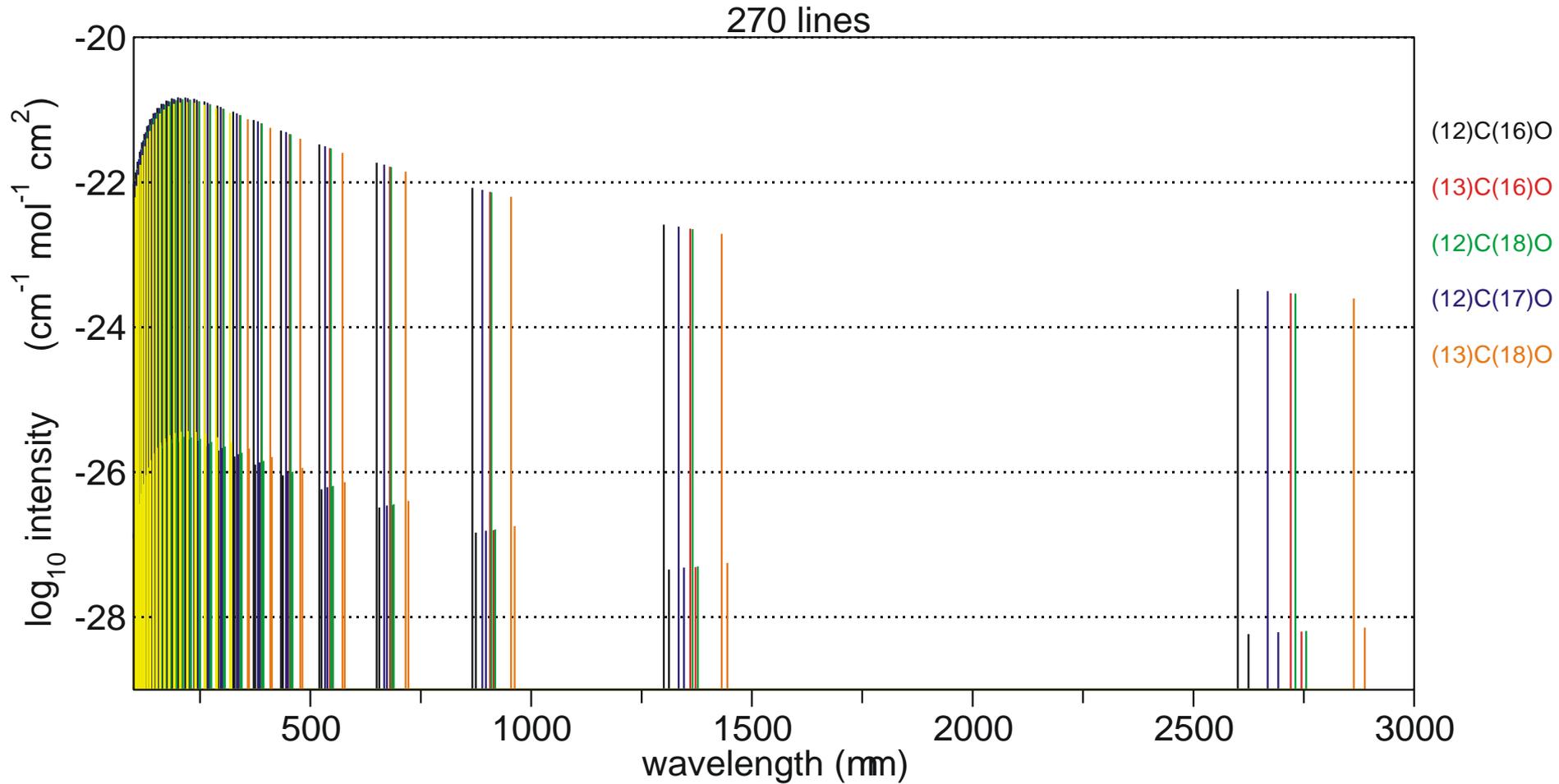


# Трудности отождествления

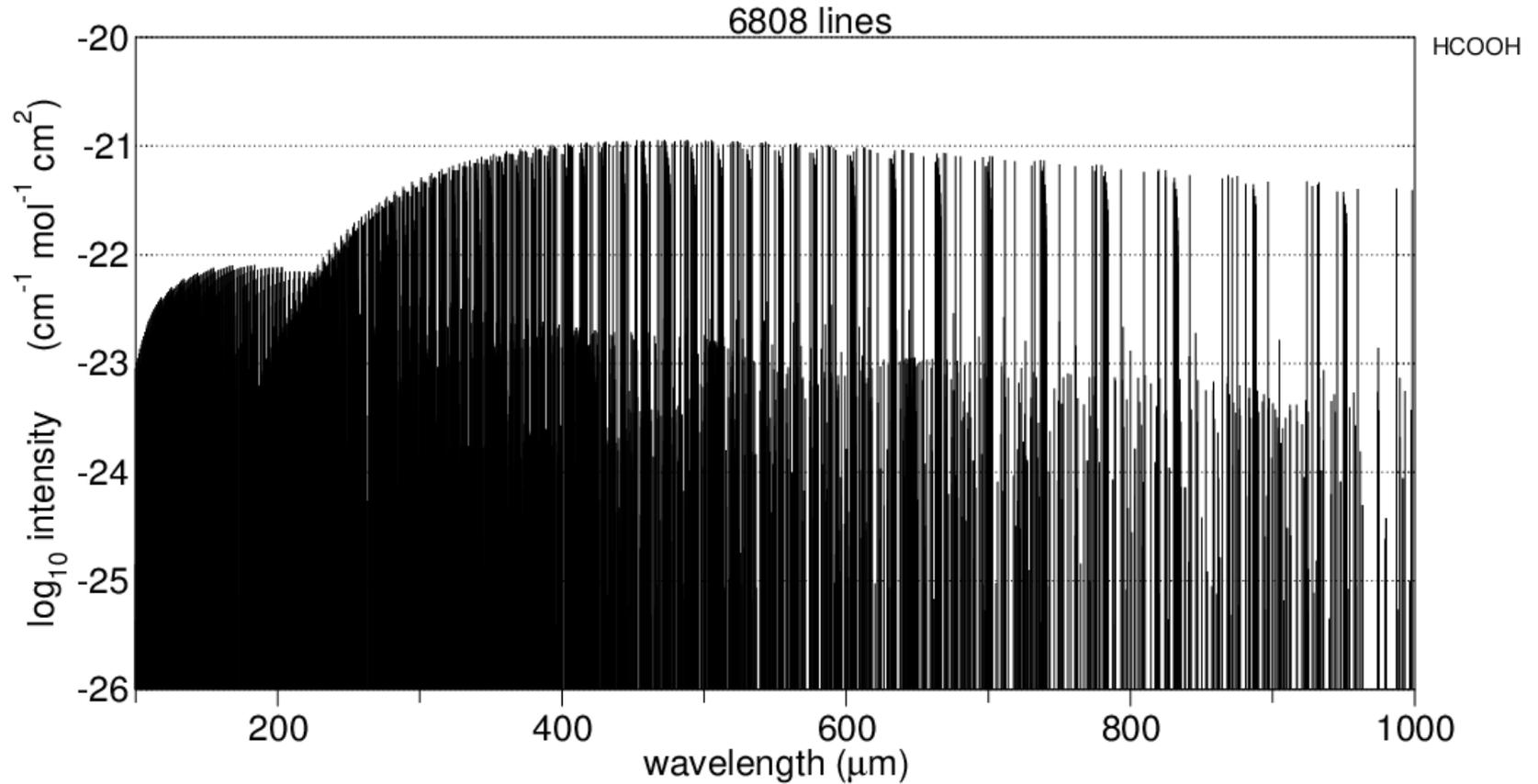
- Огромное количество линий одной молекулы
- Большое количество молекул
- Изотопологи
- Атмосферное пропускание и ограничения наблюдений
- Ограниченное количество объектов
- Отсутствие лабораторных данных о спектрах



# Спектр молекулы CO

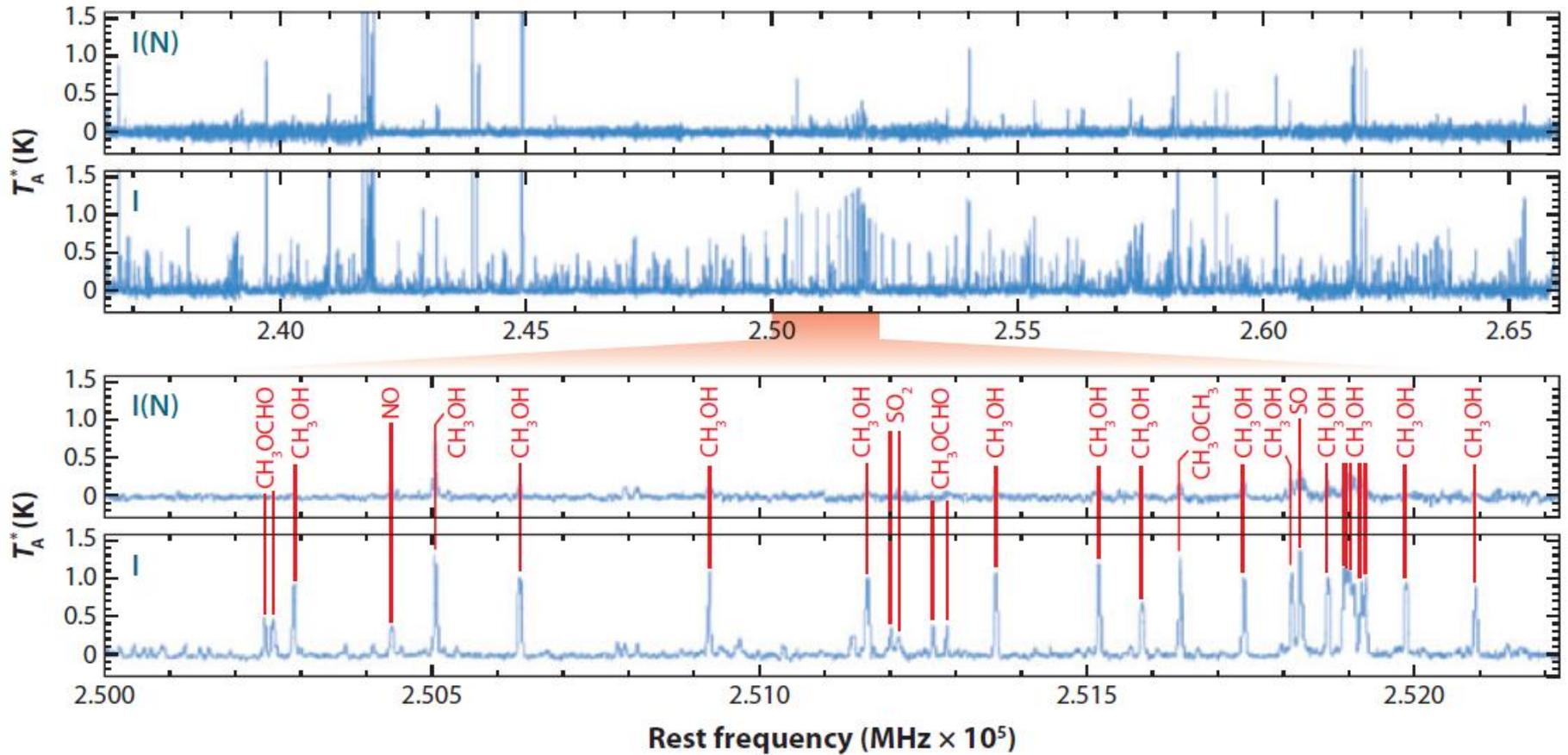


# Спектр молекулы HCOOH



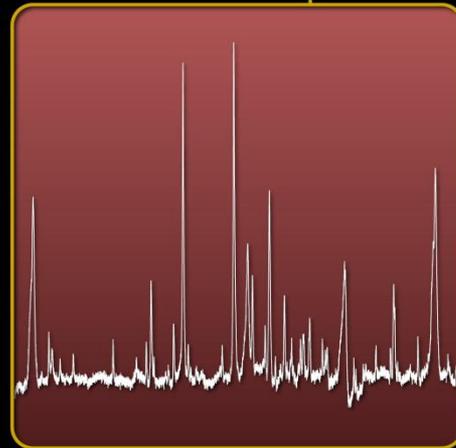
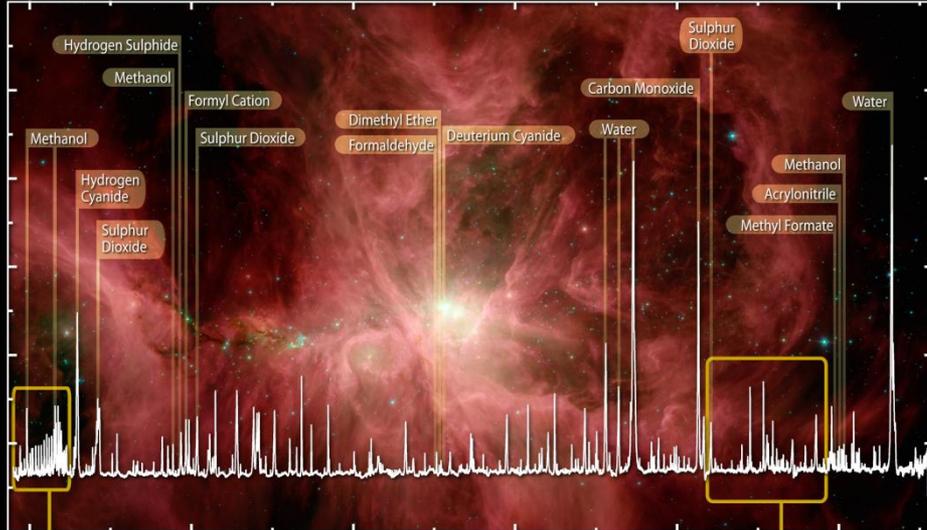
[spectralcalc.com](http://spectralcalc.com)

# Спектральные обзоры



Herbst & van Dishoeck (2009)

# Идентификация линий в Orion KL



HIFI Spectrum of Water and  
Organics in the Orion Nebula

© ESA, HEXOS and the HIFI consortium  
E. Bergin

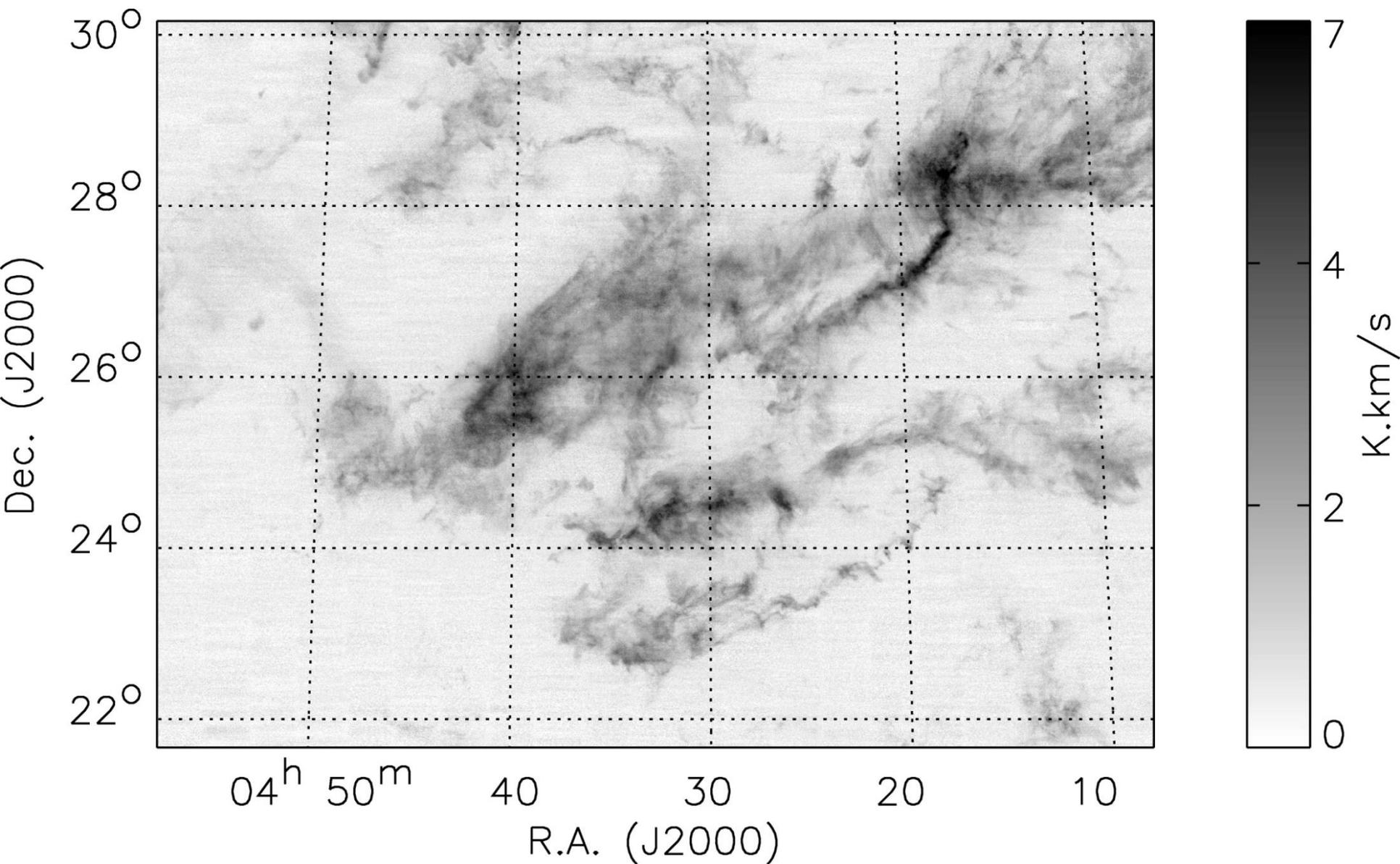
- 14400 линий в диапазоне 80-280 ГГц (Tercero et al. 2010)
- До 2005 года 8000 линий не отождествлено
- После получения лабораторных данных о спектрах изотопологов  $^{13}\text{C}$  и  $^{15}\text{N}$  молекулы  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ , изотопологов  $^{13}\text{C}$  молекулы  $\text{HCOOCH}_3$  и изотополога  $\text{CH}_3\text{OCOD}$  было отождествлено 1400 линий

Herbst & van Dishoeck (2009)

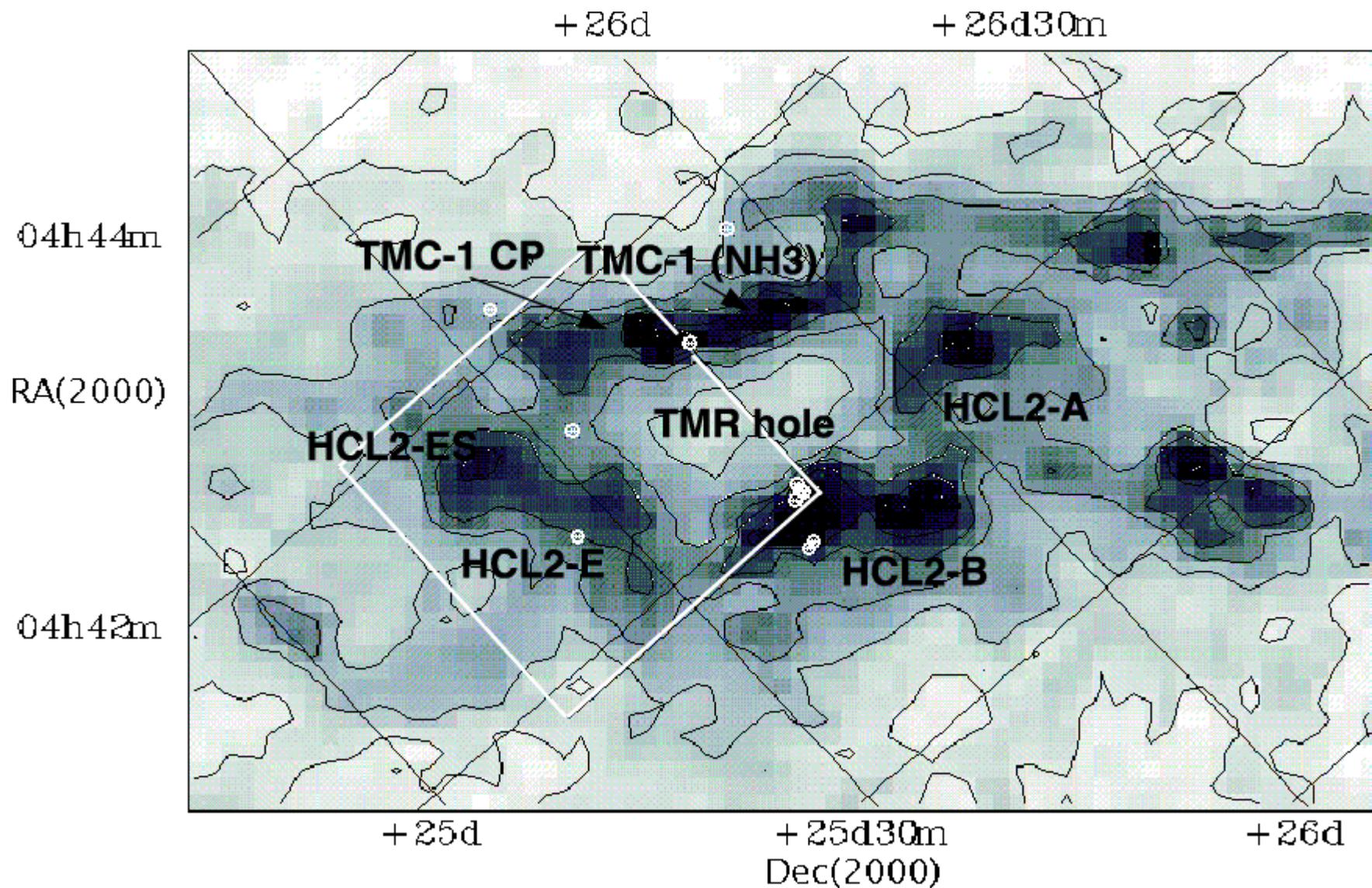
# Телец-Возничий, ТМС



# Молекулярный газ в Тельце



# Молекулярное кольцо



Молекула	Лучевая концентрация (log)	Молекула	Лучевая концентрация (log)
NH <sub>3</sub>	14.70	p-C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	12.42
CH <sub>3</sub> OH	13.16	C <sub>3</sub> N	13.55
c-C <sub>3</sub> H	13.48	HC <sub>3</sub> N	14.37
l-C <sub>3</sub> H	12.75	HNC <sub>3</sub>	11.68
l-C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	11.77	HCCNC	12.93
c-C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	13.27	C <sub>3</sub> O	11.92
CH <sub>3</sub> CCH	14.06	HC <sub>3</sub> NH <sup>+</sup>	11.87
C <sub>2</sub> O	<12.57	CH <sub>2</sub> CHCN	12.81
H <sub>2</sub> CCN	13.58	HCCCHO	11.26
CH <sub>3</sub> CN	12.61	C <sub>2</sub> S	14.01
H <sub>2</sub> CCO	12.68	OCS	<13.26
HNCO	13.03	C <sub>5</sub> H	12.27
CS	>13.46	CH <sub>3</sub> C <sub>4</sub> H	13.17
CH <sub>3</sub> CHO	12.43	CH <sub>3</sub> C <sub>3</sub> N	11.99
HCS <sup>+</sup>	12.76	C <sub>3</sub> S	13.14
H <sub>2</sub> CS	13.62	C <sub>6</sub> H	12.74
SO	>13.67	HC <sub>5</sub> N	13.77
C <sub>4</sub> H	[13.43,14.94]	HC <sub>7</sub> N	13.66
o-C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	13.28	HC <sub>9</sub> N	13.02

Gratier et al. (2016)

# Уравнения химической кинетики

$$\frac{d}{dt}n_i^g(r,t) = \sum_j \sum_l K_{lj}^g n_l^g n_j^g - n_i^g \sum_j K_{ij}^g n_j^g + \sum_{j \neq i} K_j^e n_j^g - K_i^e n_i^g$$

$$K^g = \alpha (T/300 \text{ K})^\beta \exp(-\gamma/T)$$

$$K^e = \alpha G_0 \exp(-\gamma A_V)$$

$$K^e = \alpha \zeta$$

- $n, T, \zeta, G_0, A_V$  — внешние параметры
- Набор компонентов
- $\alpha, \beta, \gamma$  — параметры реакций

# Астрохимические базы данных

## **Herbst & Clemperer (1973)**

37 компонентов и 100 реакций (5 наблюдаемых молекул)

## **Bettens & Herbst (1995)**

Около 1000 компонентов и 10000 реакций

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

420 компонентов и более 4500 реакции

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

473 компонента и более 6096 реакций



**Молекул должно быть больше, чем наблюдается**

# Udfa.net

The UMIST Database for Astrochemistry 2012 / astrochemistry.net - Internet Explorer

http://udfa.ajmarkwick.net/

Файл Правка Вид Избранное Сервис Справка

**UMIST RATE12**  
**astrochemistry.net**

Home Downloads Species Search... Follow @UM

## UMIST RATE2012 / astrochemistry.net

Welcome to the 2012 edition of **The UMIST Database for Astrochemistry**.

This is the 5th public release of the database.

The database download files and the paper are available from the [download](#) section.

### Recent updates

31/07/14: The dark cloud and circumstellar envelope model source code, an introduction to astrocher modelling and an introduction to UNIX are now available to [download](#).

16/05/14: Added a [table of three body reactions](#) previously released in RATE99 and RATE06.

.. common  
H<sub>2</sub>  
CO  
OH  
HCO<sup>+</sup>  
H<sub>3</sub><sup>+</sup>  
C<sup>+</sup>  
H<sub>2</sub>O  
C  
H  
CH<sup>+</sup>

.. in RATE12  
C  
C<sup>+</sup>  
C<sup>-</sup>  
C<sub>10</sub>  
C<sub>10</sub><sup>+</sup>  
C<sub>10</sub><sup>-</sup>  
C<sub>10</sub>H  
C<sub>10</sub>H<sup>+</sup>  
C<sub>10</sub>H<sup>-</sup>  
C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>  
C<sub>10</sub>H<sub>2</sub><sup>+</sup>  
C<sub>10</sub>H<sub>3</sub><sup>+</sup>  
C<sub>11</sub>  
C<sub>11</sub><sup>+</sup>  
C<sub>2</sub>  
C<sub>2</sub><sup>+</sup>  
C<sub>2</sub><sup>-</sup>  
C<sub>2</sub>H

# kida.obs.u-bordeaux1.fr



KINETIC DATABASE  
FOR ASTROCHEMISTRY

[Home](#)

[Species](#)

[Download](#) ▾

[References](#) ▾

[Help](#) ▾

KIDA is a database of kinetic data of interest for astrochemical (interstellar medium and planetary atmospheres) studies.

SEARCH

*Indicate a species (ex: H3O+) or a couple of species (ex: C + H2)  
Warning : Second letter of 2-letters elements have to be lowercase, eg Si*



@kida\_database

16:55, Nov 18

RT @AndersSChristen : Which program is fastest for QM MD (gasphase) for small

# Молекулы в ТМС

Компонент	Модель	Наблю- дения	Согласие	Компонент	Модель	Наблю- дения	Согласие
CO	3.7(18)	8.0(17)	+	HC <sub>9</sub> N	1.2(12)	3.0(12)	+
C <sub>2</sub> O	3.0(11)	6.0(12)		CH <sub>2</sub> CHCN	2.9(11)	2.0(12)	+
C <sub>3</sub> O	8.2(12)	1.0(12)	+	CS	1.0(14)	1.0(14)	+
C <sub>2</sub>	8.3(13)	5.0(14)	+	HCS <sup>+</sup>	6.2(10)	6.0(12)	
OH	3.6(14)	3.0(15)	+	C <sub>2</sub> S	1.3(13)	8.0(13)	+
CH	9.2(13)	2.0(14)	+	C <sub>3</sub> S	5.9(12)	1.0(13)	+
C <sub>2</sub> H	7.1(13)	7.0(14)	+	HCO <sup>+</sup>	7.2(13)	8.0(13)	+
C <sub>3</sub> H	2.6(13)	5.0(12)	+	H <sub>2</sub> CO	3.0(14)	2.0(14)	+
C <sub>4</sub> H	2.1(13)	2.0(14)	+	H <sub>2</sub> CCO	4.8(13)	1.0(13)	+
C <sub>5</sub> H	7.9(12)	3.0(12)	+	OCS	6.0(12)	2.0(13)	+
C <sub>6</sub> H	2.3(12)	1.0(12)	+	SO	8.4(12)	5.0(13)	+
CH <sub>3</sub> CCH	7.9(12)	6.0(13)	+	SO <sub>2</sub>	3.2(12)	7.0(12)	+
CH <sub>3</sub> C <sub>4</sub> H	4.3(11)	2.0(12)	+	CH <sub>3</sub> CHO	2.0(12)	6.0(12)	+
CN	1.8(14)	3.0(14)	+	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	1.4(14)	1.0(14)	+
C <sub>3</sub> N	1.8(12)	1.0(13)	+	CH <sub>3</sub> OH	2.8(10)	2.0(13)	
CH <sub>3</sub> CN	2.0(13)	1.0(13)	+	CH <sub>2</sub> CN	7.1(12)	5.0(13)	+
CH <sub>3</sub> C <sub>3</sub> N	1.7(12)	5.0(12)	+	H <sub>2</sub> S	1.9(11)	3.0(11)	+
HCN	5.0(14)	2.0(14)	+	H <sub>2</sub> CS	4.5(13)	3.0(13)	+
HNC	4.7(14)	2.0(14)	+	NO	2.7(16)	2.5(14)	
HCNH <sup>+</sup>	5.6(12)	1.9(13)	+	HCOOH	4.7(13)	1.0(12)	
HC <sub>3</sub> N	2.5(14)	6.0(13)	+				
HC <sub>5</sub> N	3.8(13)	3.0(13)	+				
HC <sub>7</sub> N	8.2(12)	1.0(13)	+				

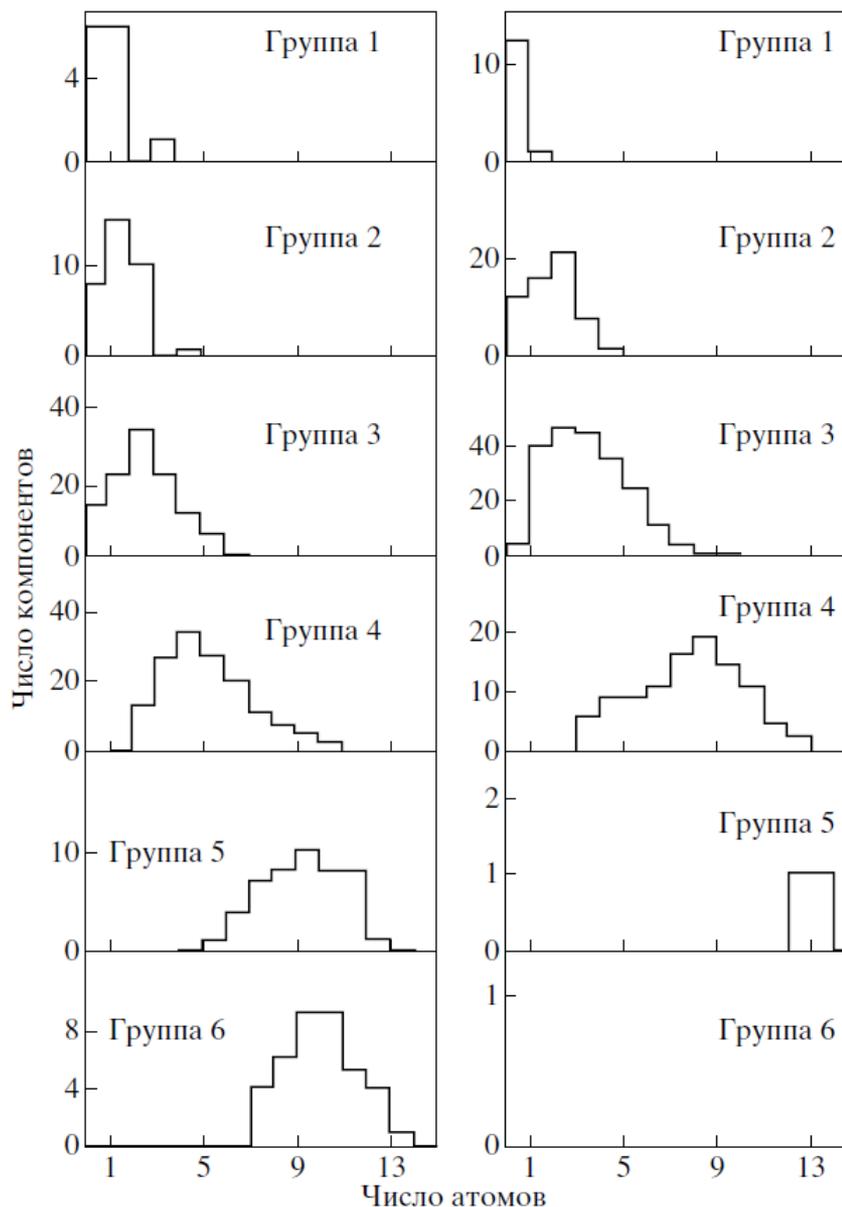
Лучевые концентрации (см<sup>-2</sup>)  
Кочина и др. (2013)

# Неточности коэффициентов скоростей

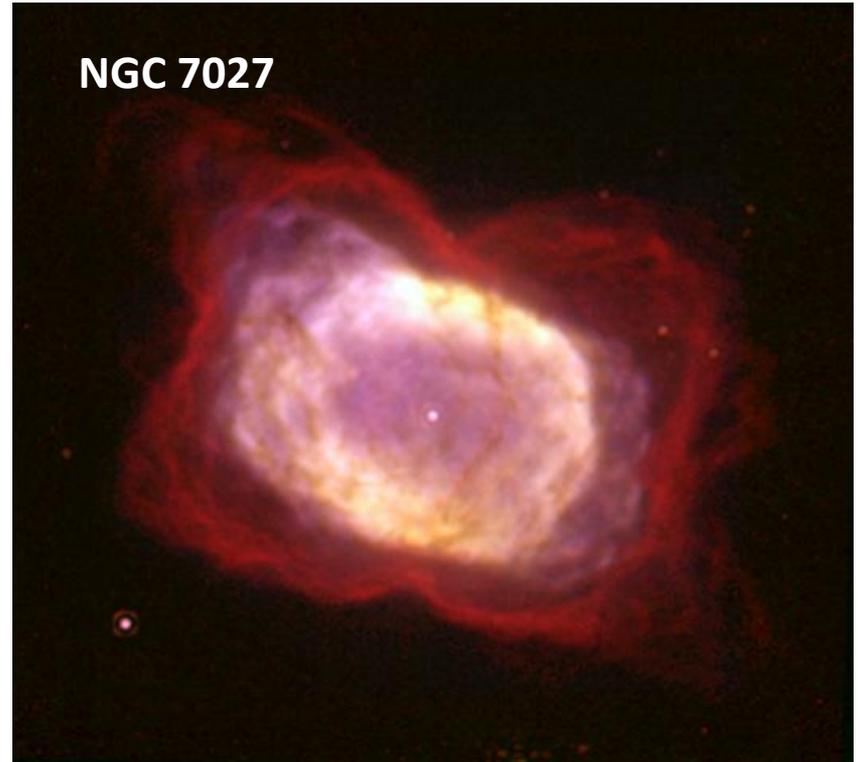
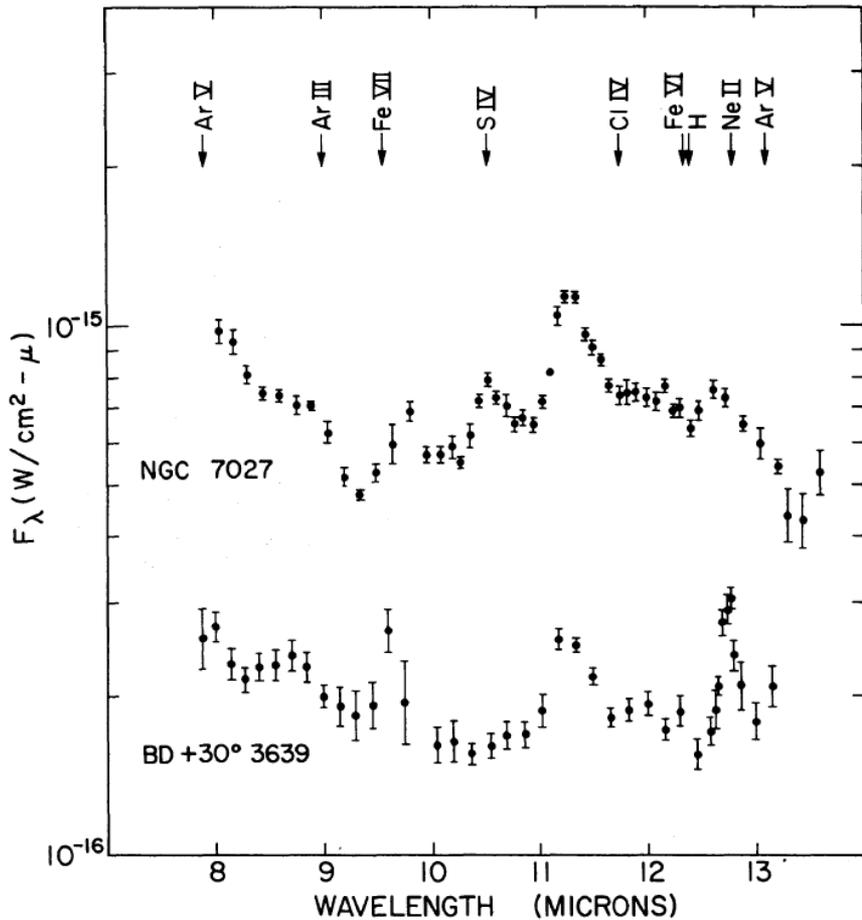
- UDFA — четыре класса точности (A, B, C, D, E), соответствующих ошибкам в параметре  $\alpha$  25%, 50%, 2 раза, порядок величины, очень много
  - A — 1381 реакция (измеренные скорости)
  - B — 411 реакций (нейтраль-нейтральные и фотодиссоциация)
  - C — 3261 реакция (почти все ион-молекулярные реакции)
  - D — 1111 реакций (фотодиссоциация)
  - E — 8 реакций

# Анализ роли ошибок в скоростях реакций

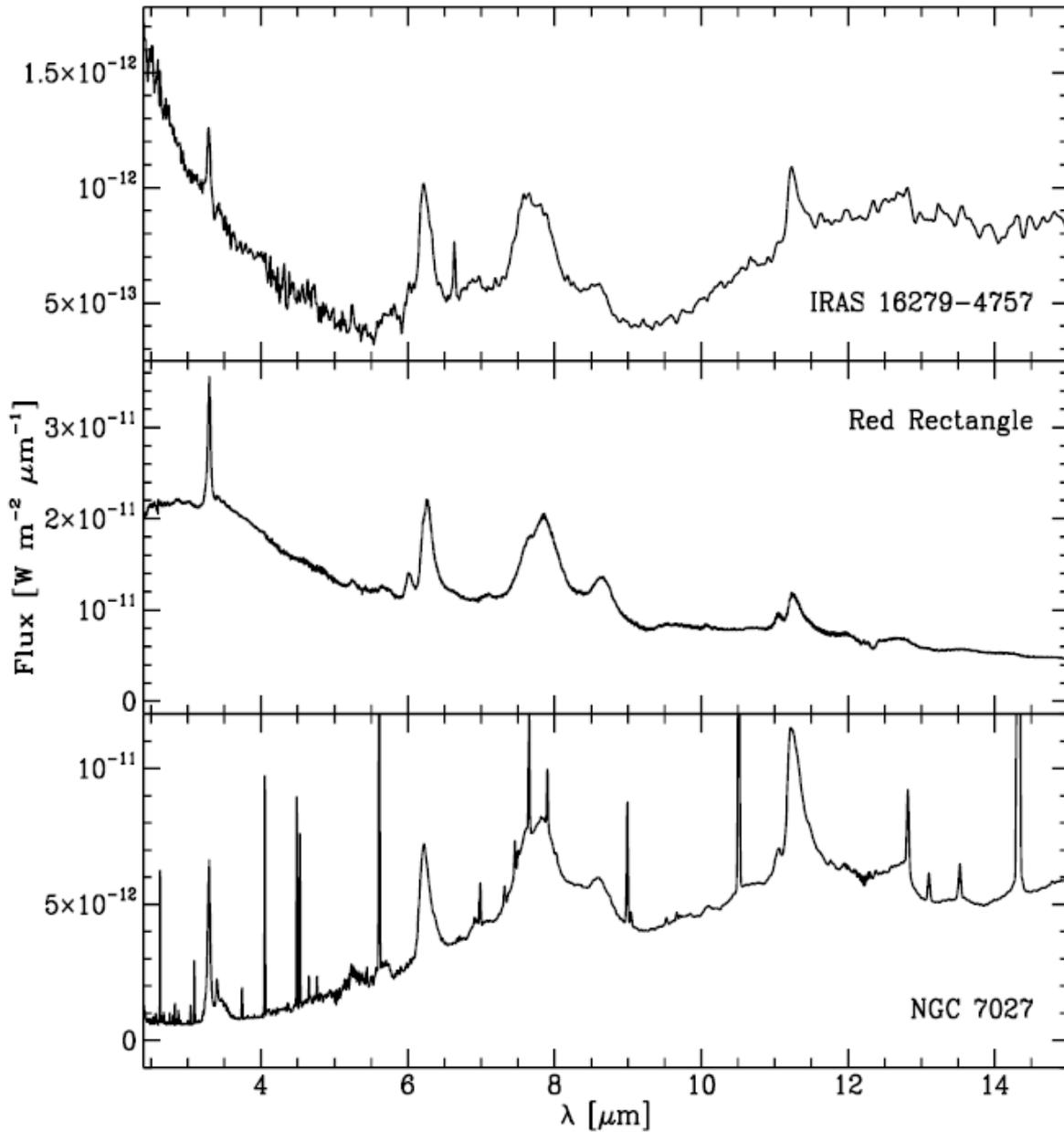
1. Разброс обилий  $< 0.25$  порядка величины.
2. Разброс обилий  $0.25-0.5$  порядка величины.
3. Разброс обилий  $0.5-1.0$  порядка величины.
4. Разброс обилий  $1.0-2.0$  порядка величины.
5. Разброс обилий  $2.0-3.0$  порядка величины.
6. Разброс обилий  $> 3.0$  порядков величины.



# Неидентифицированные инфракрасные полосы



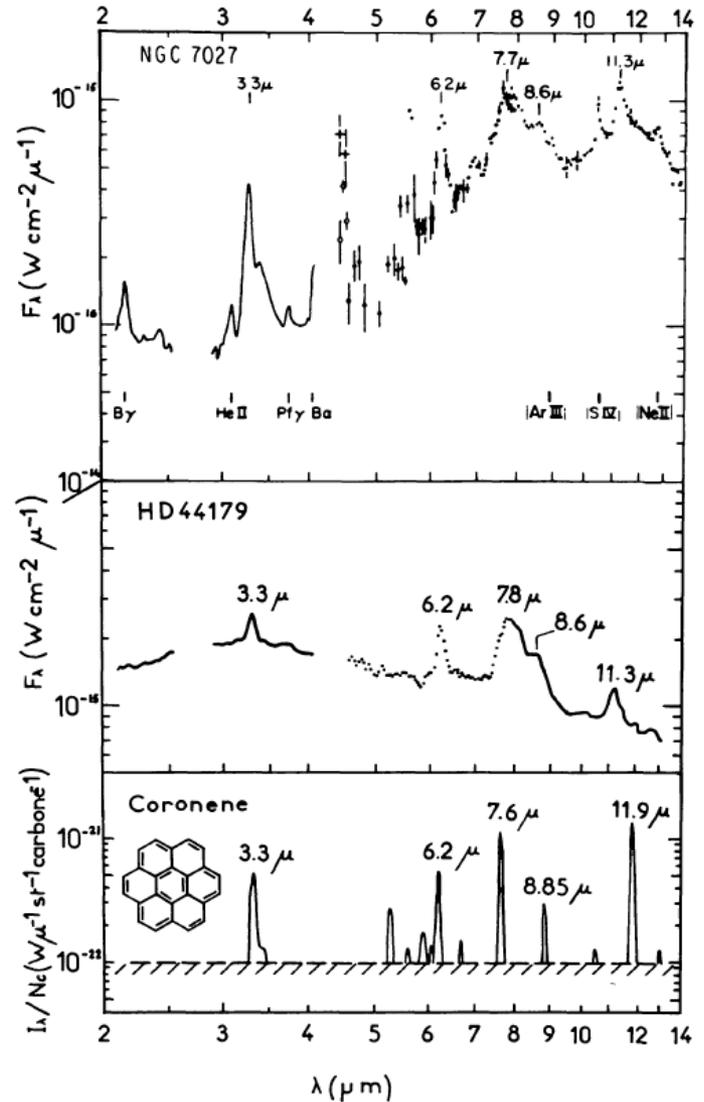
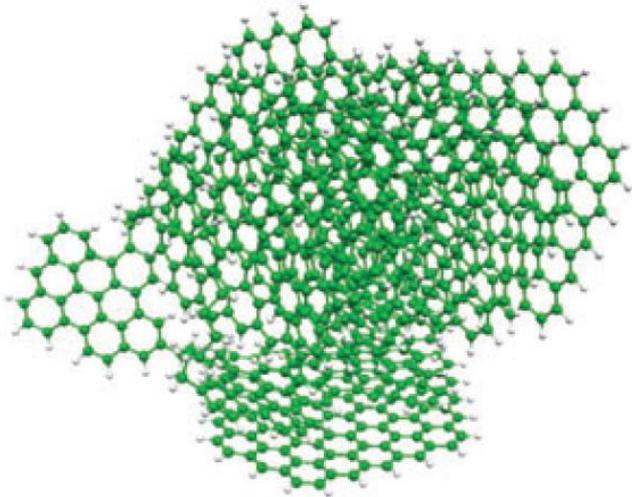
Gillett et al. (1973)



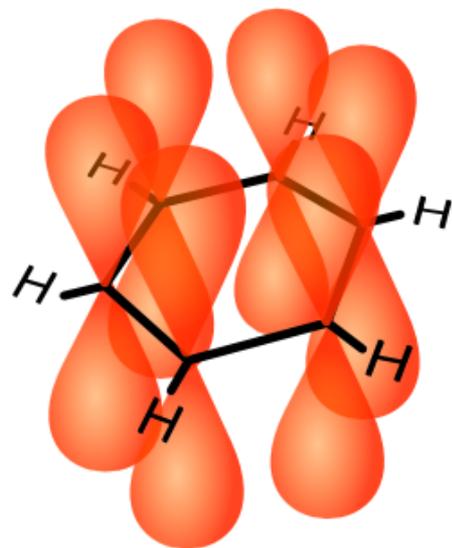
Существенная доля (десятки процентов) всего излучения в ИК-диапазоне

# Гипотеза о макромолекулах

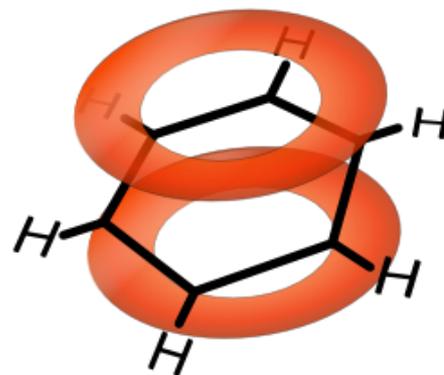
- Наличие связей С-С, С-Н
- Устойчивость
- Leger & Puget (1984),  
Allamandola et al. (1985)



# Полициклические ароматические углеводороды



6 p-орбиталей

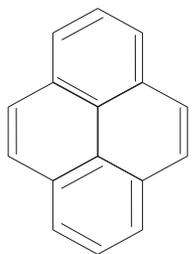


Делокализованные

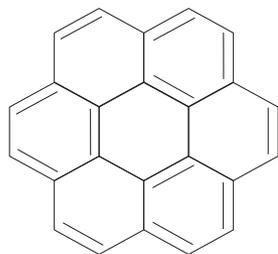


# Структура ПАУ

## Пери-конденсированные

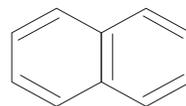


Пирен ( $C_{16}H_{10}$ )

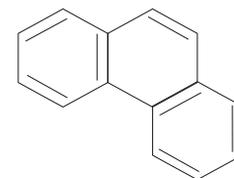


Коронен ( $C_{24}H_{12}$ )

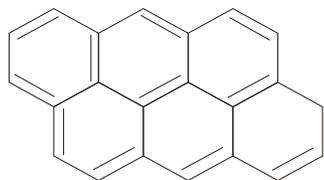
## Орто-конденсированные



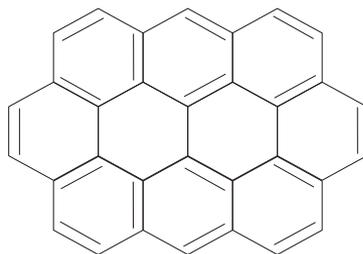
Нафталин ( $C_{10}H_8$ )



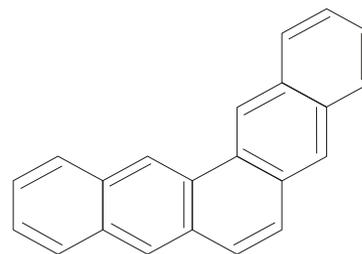
Фенантрен ( $C_{14}H_{10}$ )



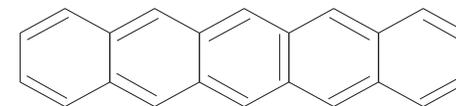
Антрацен ( $C_{14}H_{10}$ )



Овален ( $C_{32}H_{14}$ )



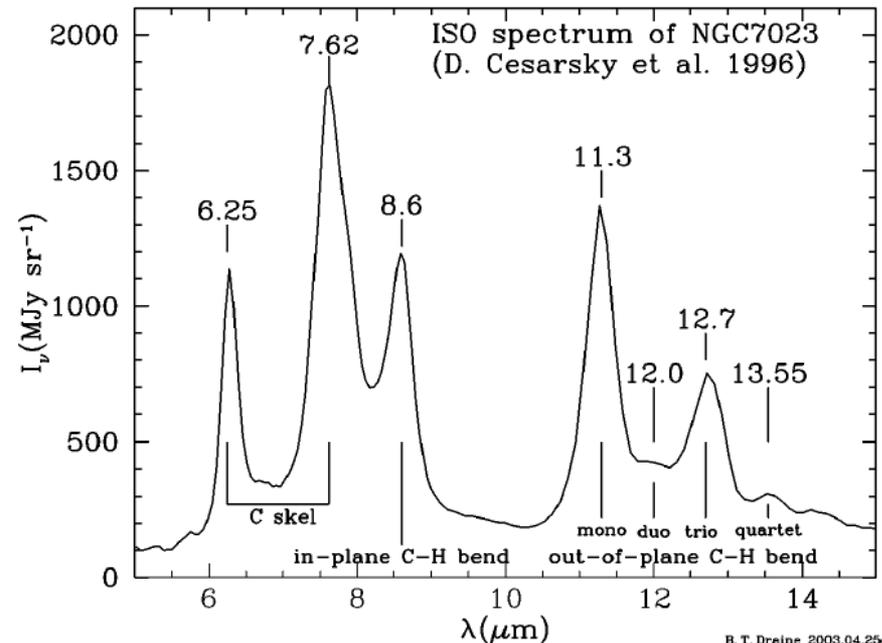
Пентафен ( $C_{22}H_{14}$ )



Пентацен ( $C_{22}H_{14}$ )

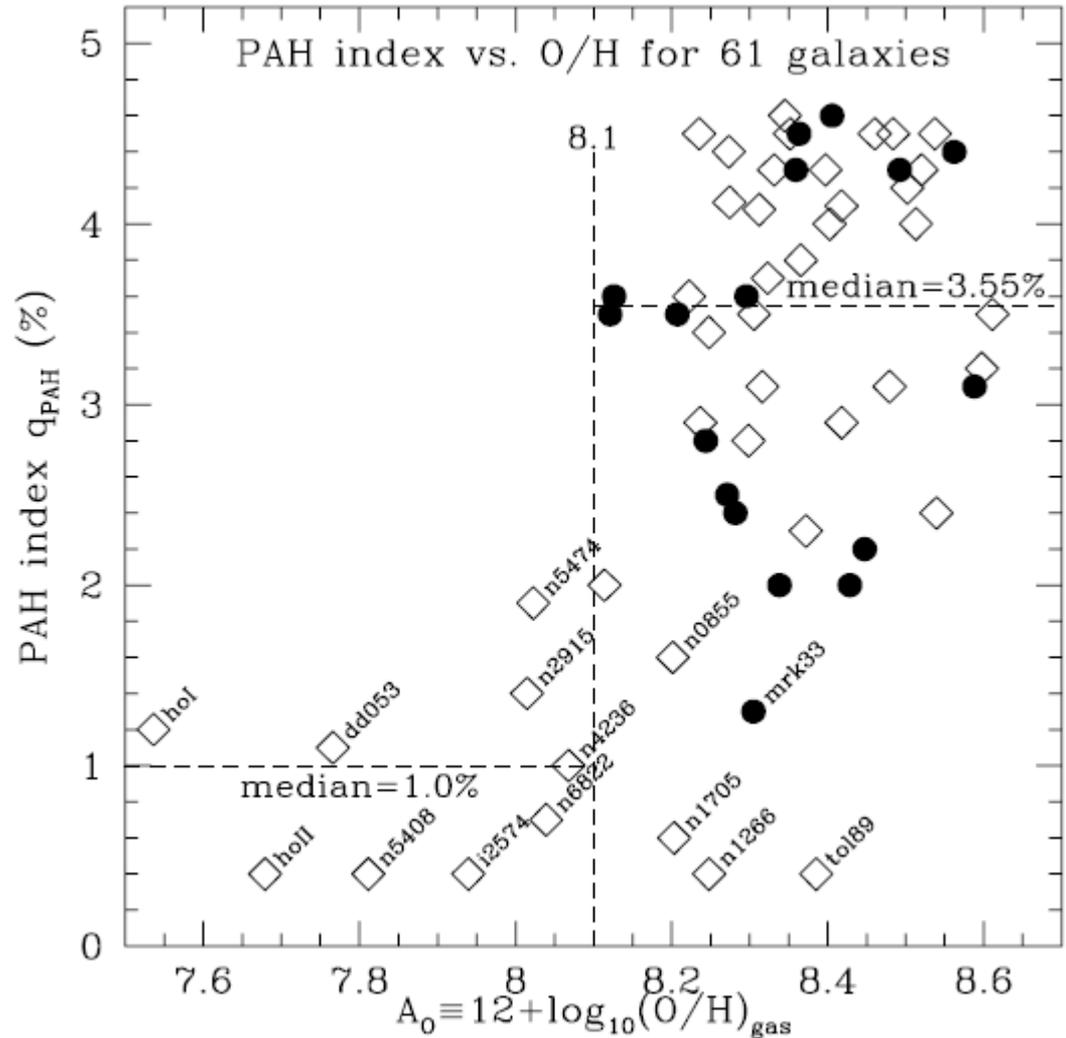
# Основные полосы ПАУ

Полоса	Описание
3.3 мкм	Растяжение ароматических связей С–Н
5.2, 5.65 мкм	Изгиб С–Н, растяжение С–С
6.2 мкм	Растяжение ароматических связей С–С
7.6, 7.8 мкм	Растяжение С–С, изгиб С–Н в плоскости молекулы
8.6 мкм	Изгиб С–Н в плоскости молекулы
11, 11.2, 13.6, 14.2 мкм	Изгиб С–Н вне плоскости молекулы



# ПАУ и металличность

Наблюдения органических молекул в других галактиках немногочисленны!

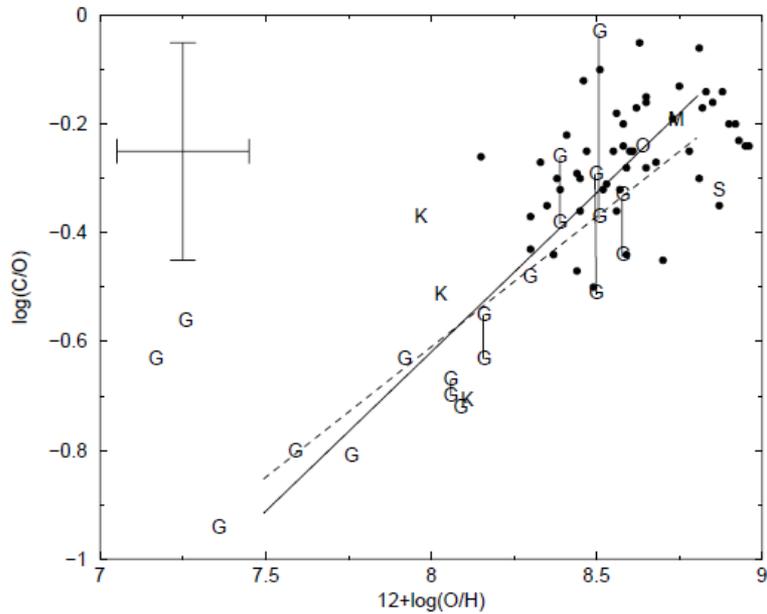




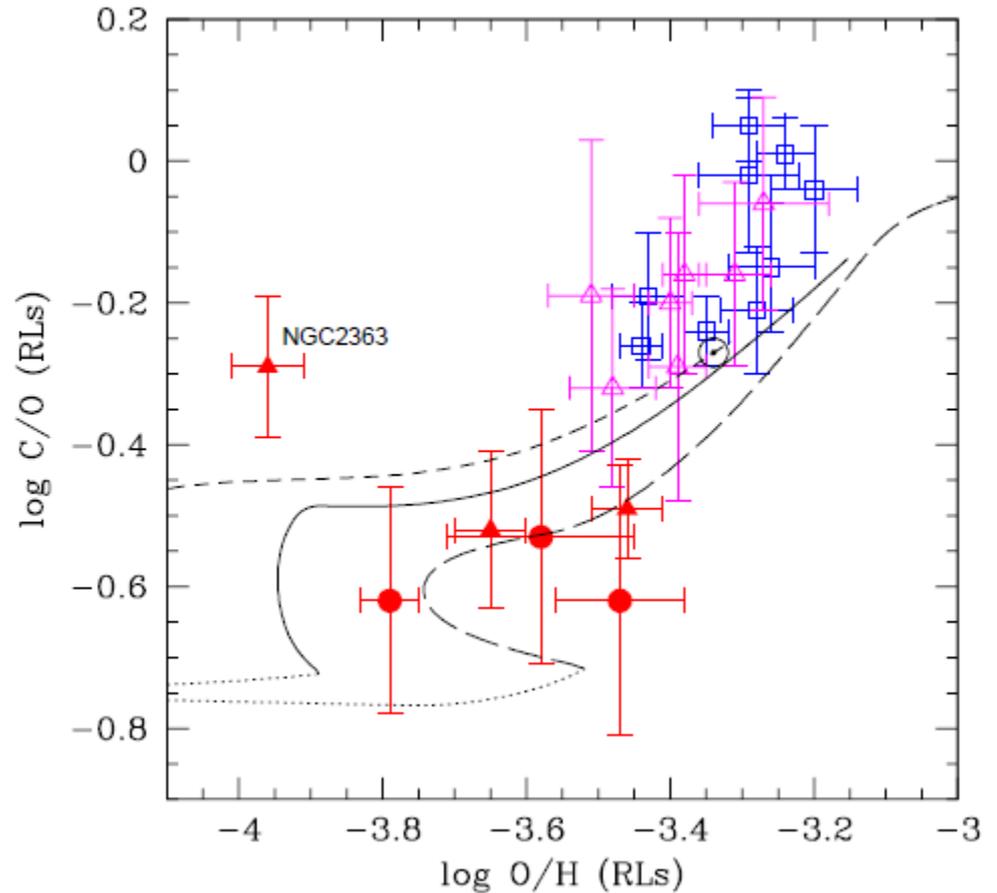
# Зависимость эволюции ПАУ от металличности

- **Меньше металличность — меньше отношение C/O — менее эффективный синтез**

# Отношение C/O в зонах HII

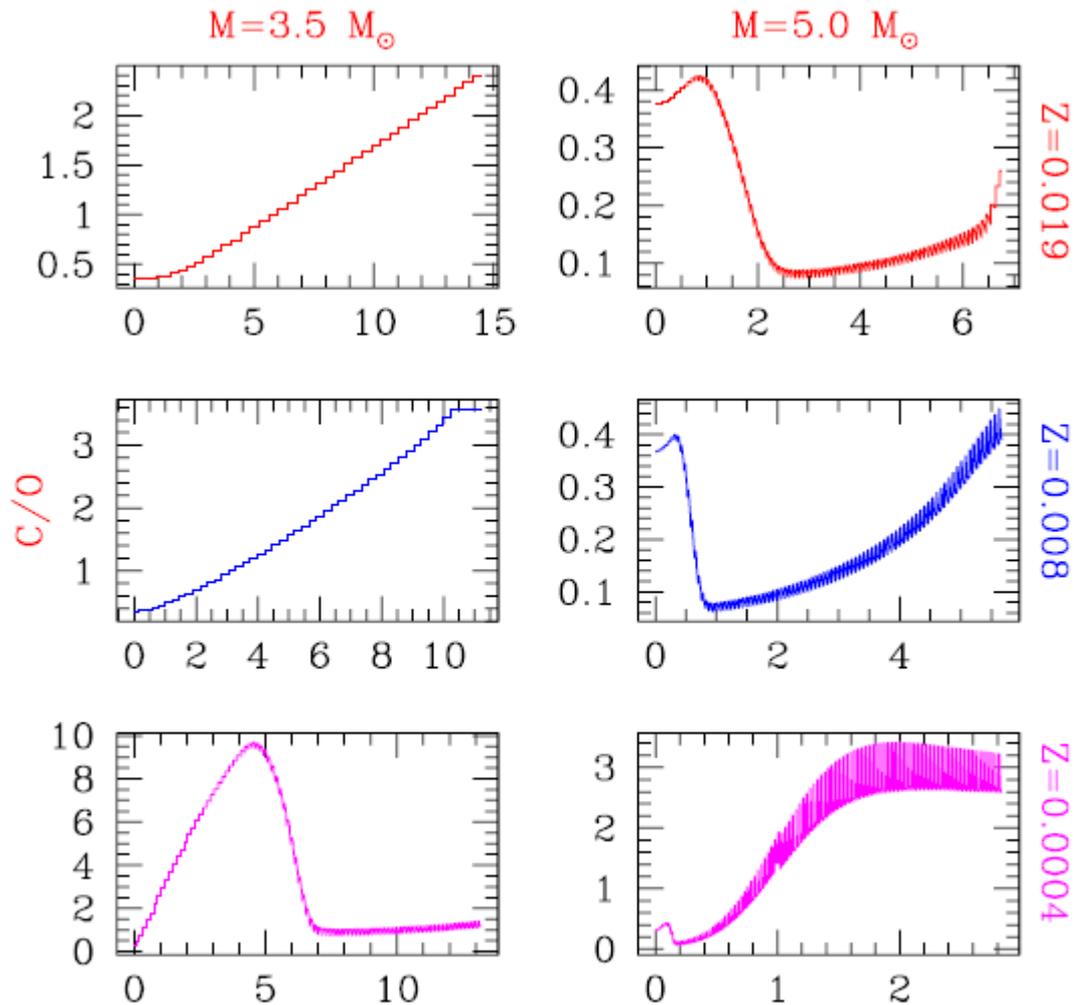


Henry & Worthey (1999)



Esteban et al. (2014)

# Отношение C/O в АВГ-звездах



Marigo (2008)

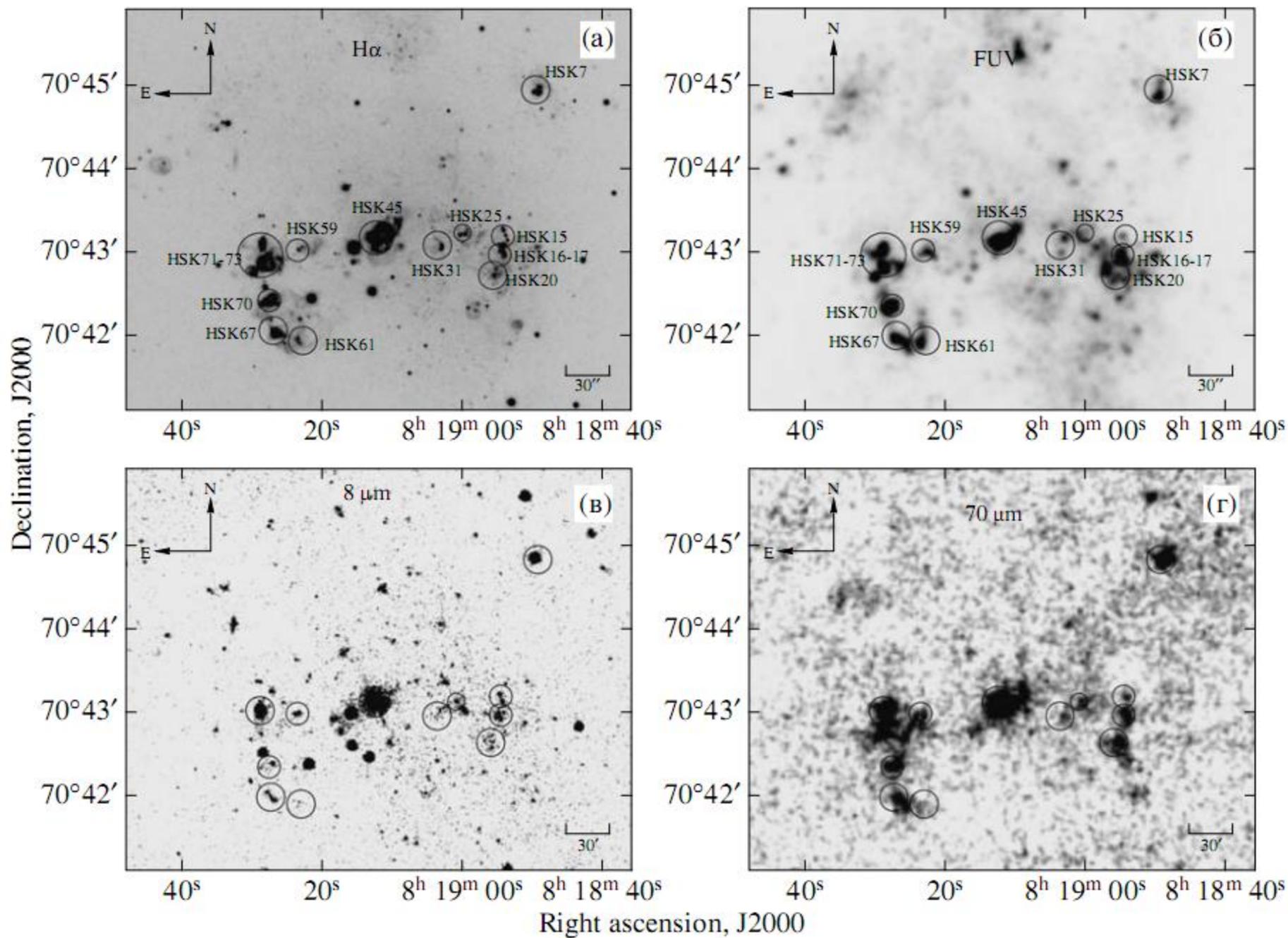
time on TP-AGB (in  $10^5$  yr)

# Зависимость эволюции ПАУ от металличности

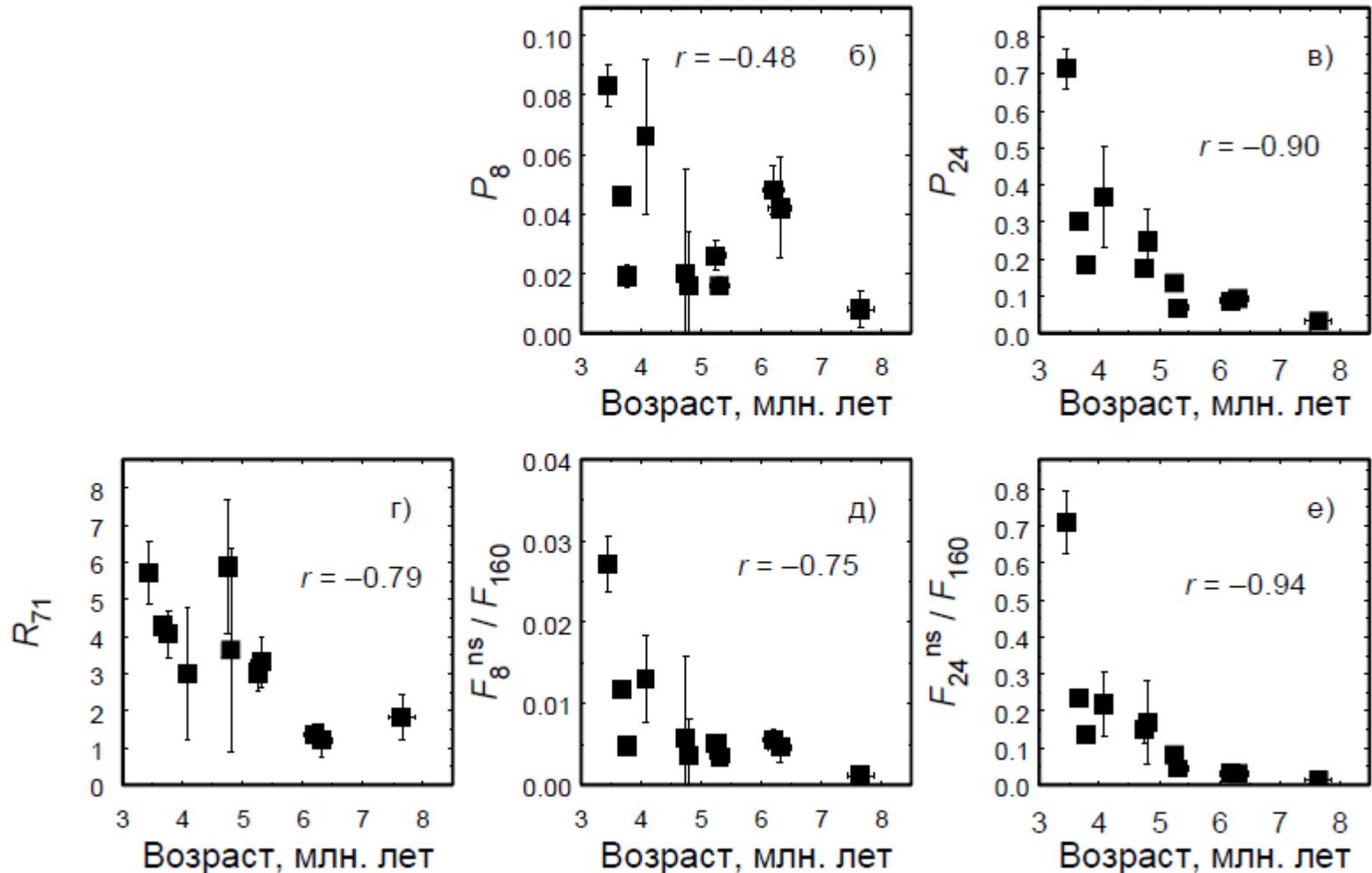
- **Меньше металличность — меньше отношение C/O — менее эффективный синтез**
- **Меньше металличность — медленнее охлаждается газ в UV — сильнее тепловое разрушение**
- **Меньше металличность — меньше непрозрачность, более жёсткий спектр в УФ — сильнее фоторазрушение**

# Галактика Holmberg II: не содержит ГМО!

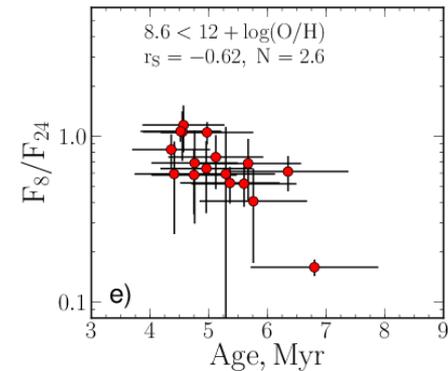
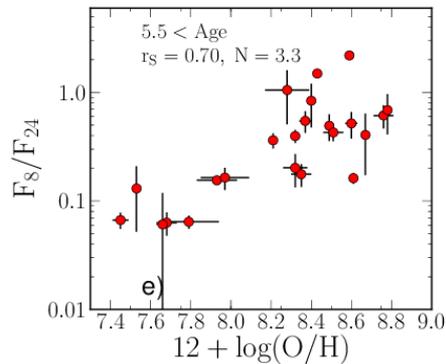
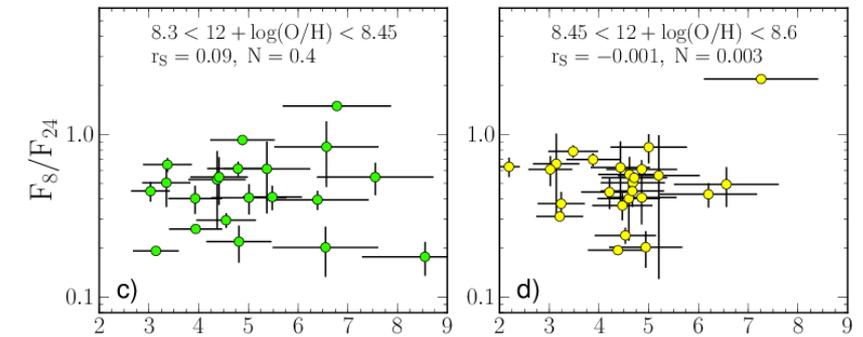
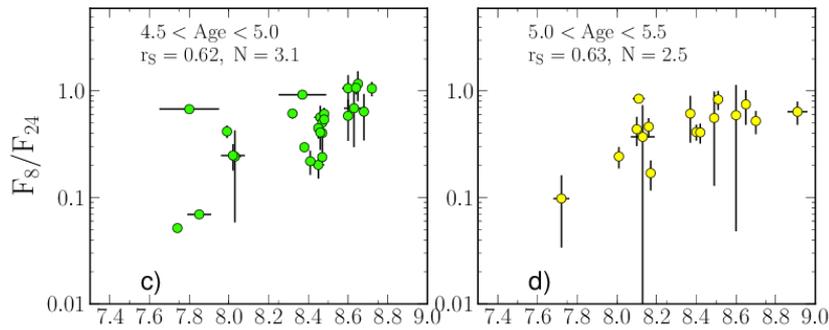
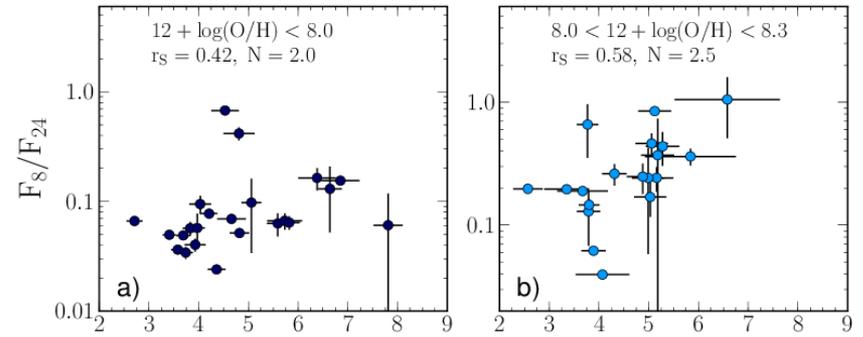
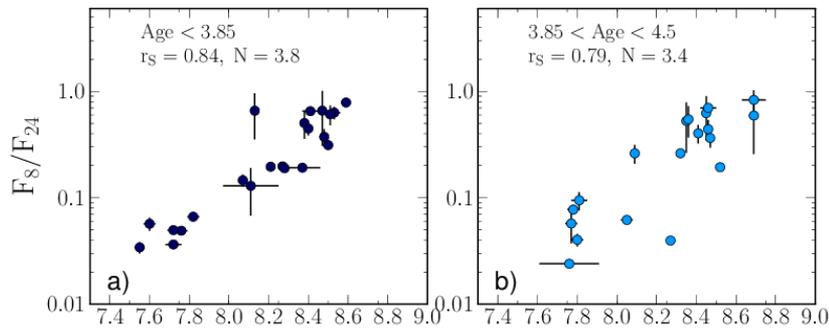




# Зависимость параметров излучения пыли от возраста комплекса НII



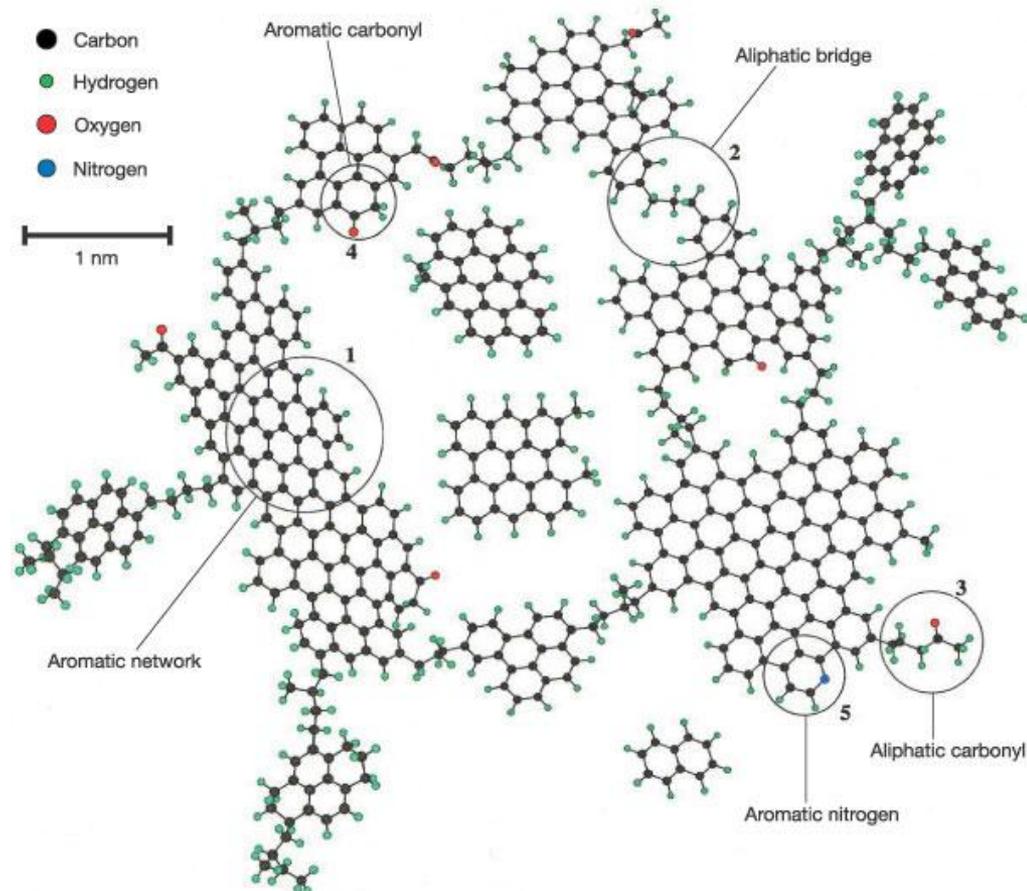
# Образование ПАУ в ОЗО?



Khramtsova, Wiebe, Lozinskaya, Egorov (2014)

# Ароматизация пыли

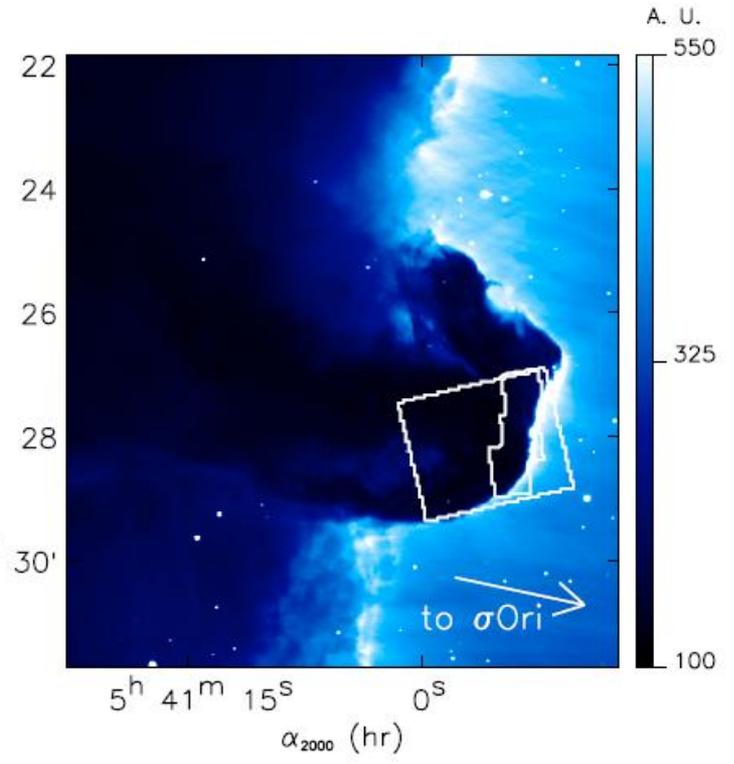
- Разрушение пылинок при взаимных столкновениях
- Разрушение пылинок горячим газом
- Фоторазрушение пылинок





$\delta_{2000}$  (degree)

$-2^{\circ} 30'$

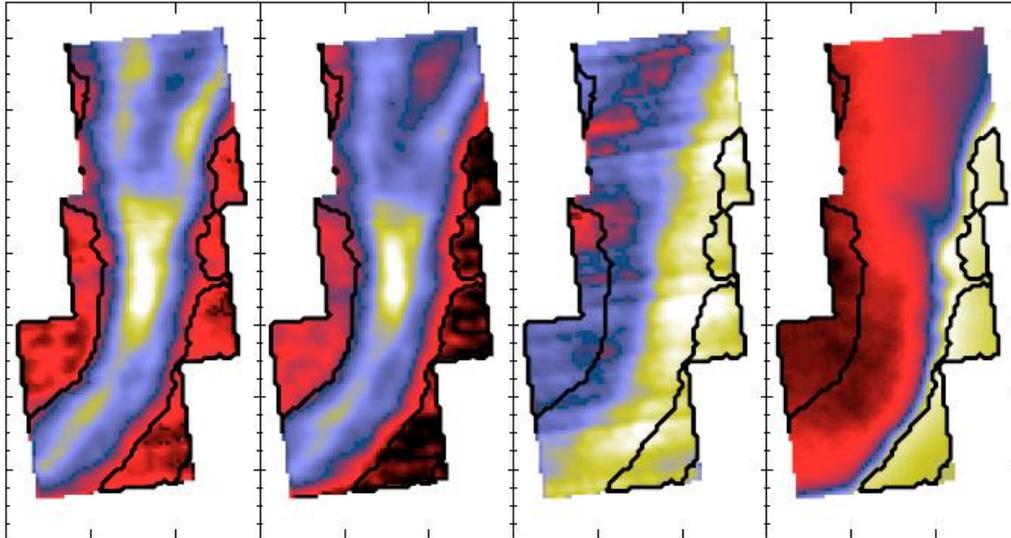


11.3  $\mu\text{m}$  AIB

$\text{H}_2$  0-0 S(2)

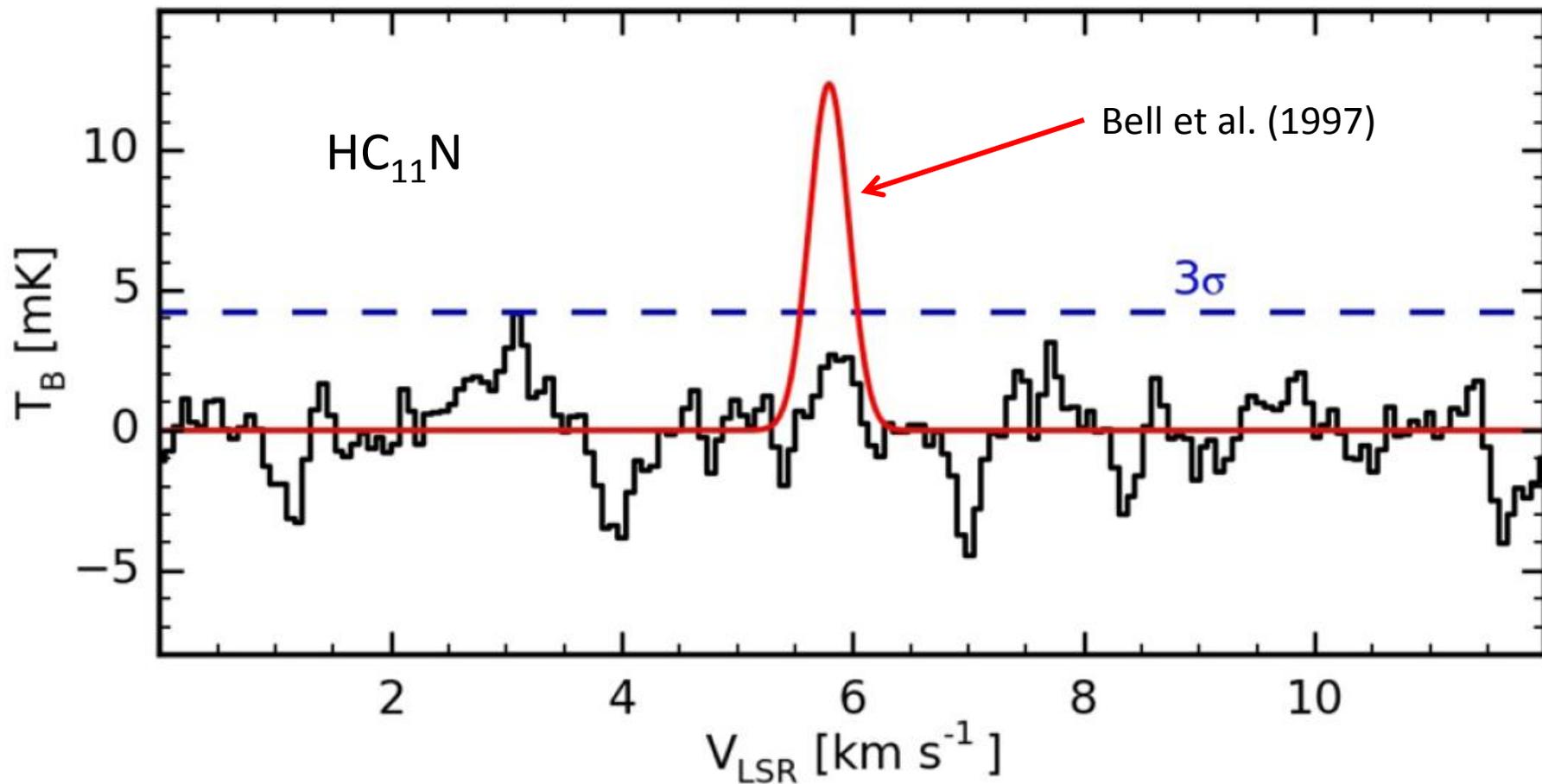
[NeII] 12.8  $\mu\text{m}$

$\text{H}\alpha$



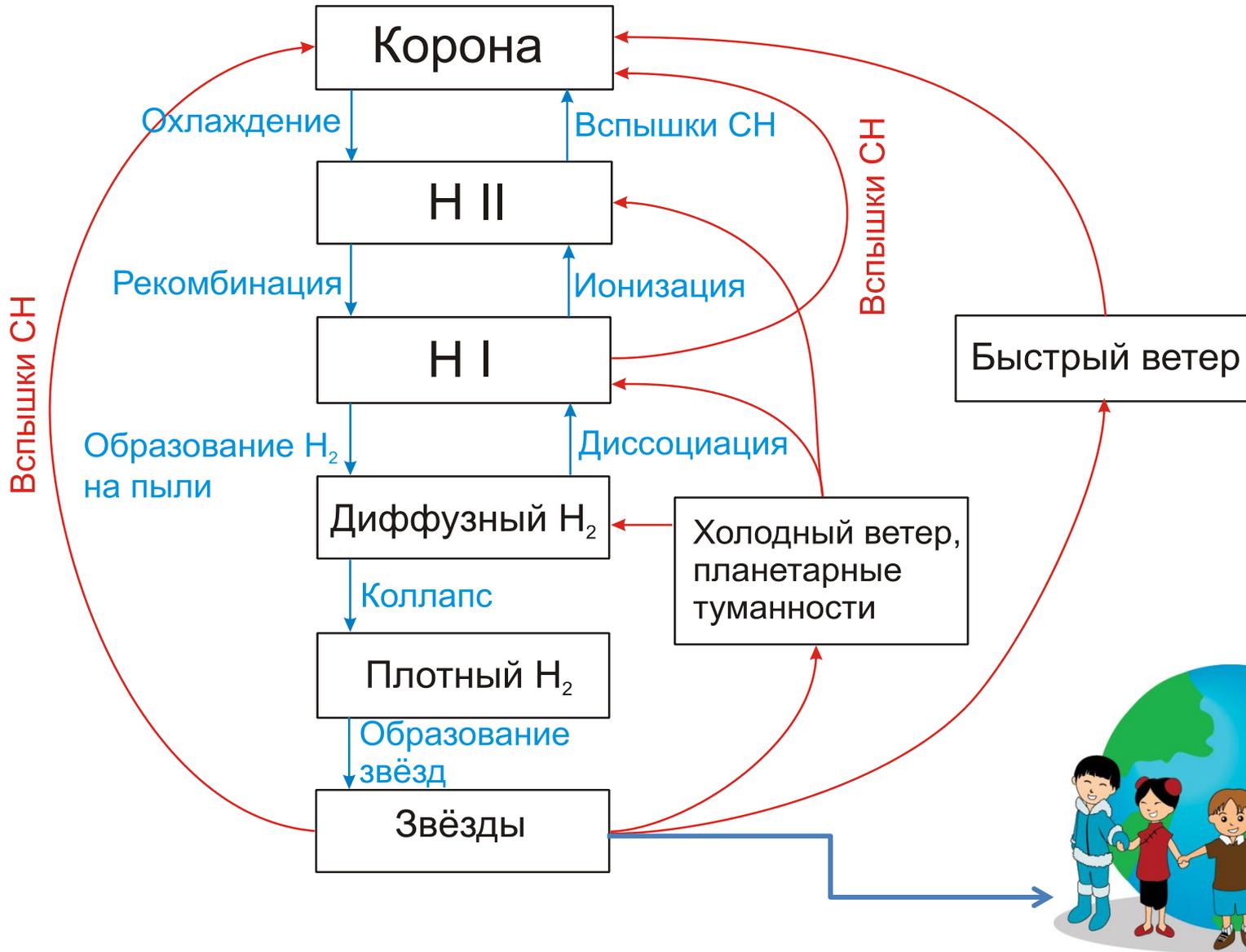
Compiegne et al. (2007); IRS

# Образование ПАУ в молекулярных облаках?



Loomis et al. (2016)

# Круговорот вещества в МЗС

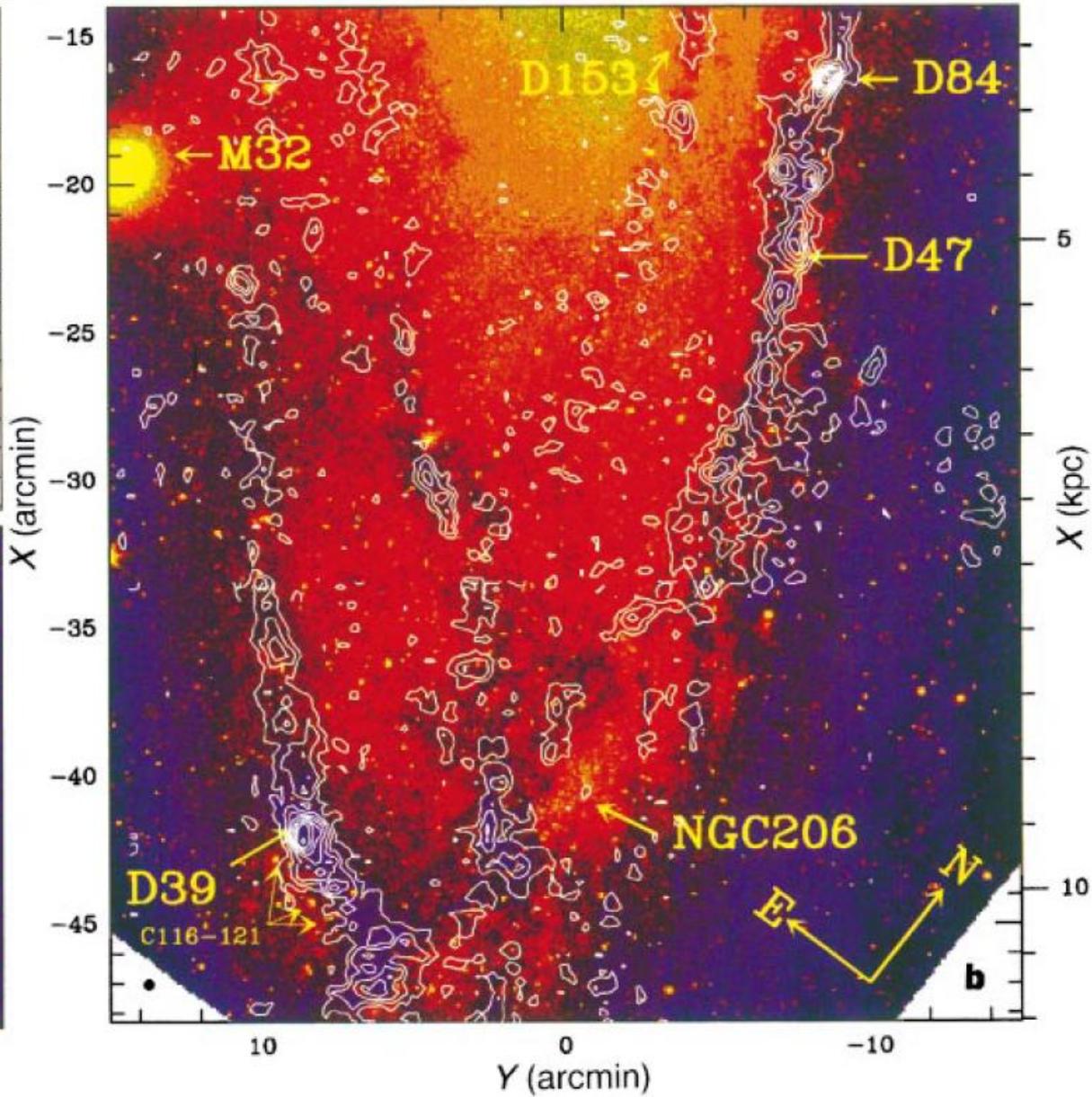
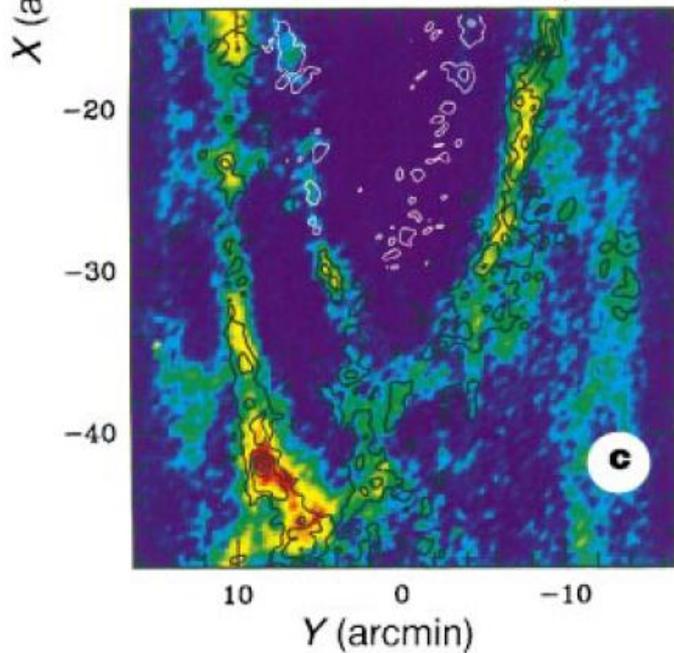
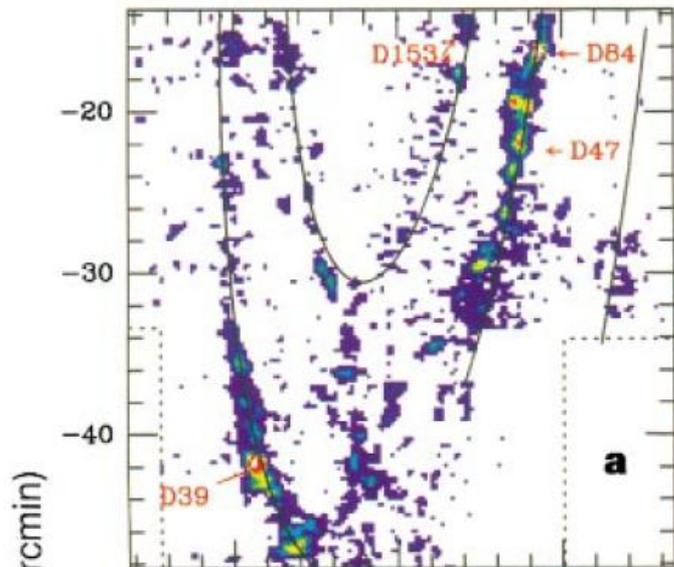


# Молекулярные облака

- Массы — до  $6 \cdot 10^6 M_{\odot}$
- Размеры — десятки пк
- Температура — 10–50 К
- Плотность — более  $200 \text{ см}^{-3}$



# Молекулярные облака в М31



# Структура молекулярных облаков

Bergin & Tafalla (2007)

Параметр	Облако (cloud)	Сгусток (clump)	Ядро (core)
Масса ( $M_{\odot}$ )	$10^3$ – $10^4$	50–500	0.5–5
Размер (пк)	2–15	0.3–3	0.03–0.2
Плотность ( $\text{см}^{-3}$ )	50–500	$10^3$ – $10^4$	$10^4$ – $10^5$
Дисперсия скоростей ( $\text{км с}^{-1}$ )	2–5	0.3–3	0.1–0.3
Динамическое время (млн. лет)	2–4	$\approx 1$	0.5–1
Температура газа (К)	$\approx 50$	10–20	8–12
Магнитное поле (мкГс)	1–10	3–30	10–50
Примеры	Телец, Змееносец	B213, L1709	L1544, CB17, B68

Место рождения:

**звёздных комплексов** звёздных скоплений

звёзд

# Диффузная и плотная среда



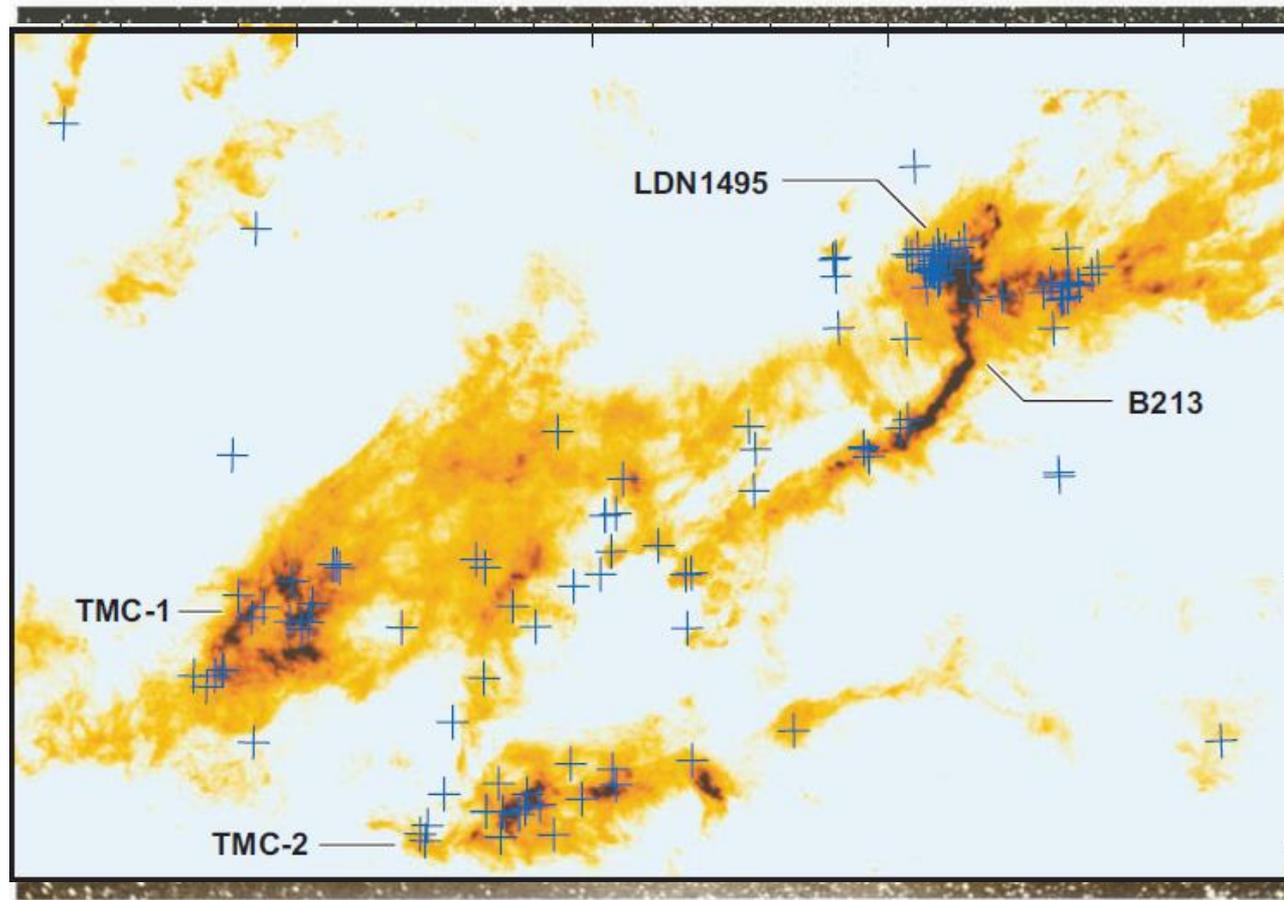
	Диффузные атомарные	Диффузные молекулярные	Полупрозрачные (translucent)	Плотные молекулярные
Определяющая характеристика	$f(\text{H}_2) < 0.1$	$f(\text{H}_2) > 0.1$ $f(\text{C}^+) > 0.5$	$f(\text{C}^+) < 0.5$ $f(\text{CO}) < 0.9$	$f(\text{CO}) > 0.9$
$A_V$	0	0.2	1–2	5–10
$n_{\text{H}}$ (см <sup>-3</sup> )	10–100	100–500	500–5000	> 5000
T (К)	30–100	30–100	15–50	10–50
Методы исследования	УФ, оптика 21 см	УФ, оптика, ИК, мм (погл)	Оптика, ИК, мм, мм (изл)	ИК (погл), мм (изл)



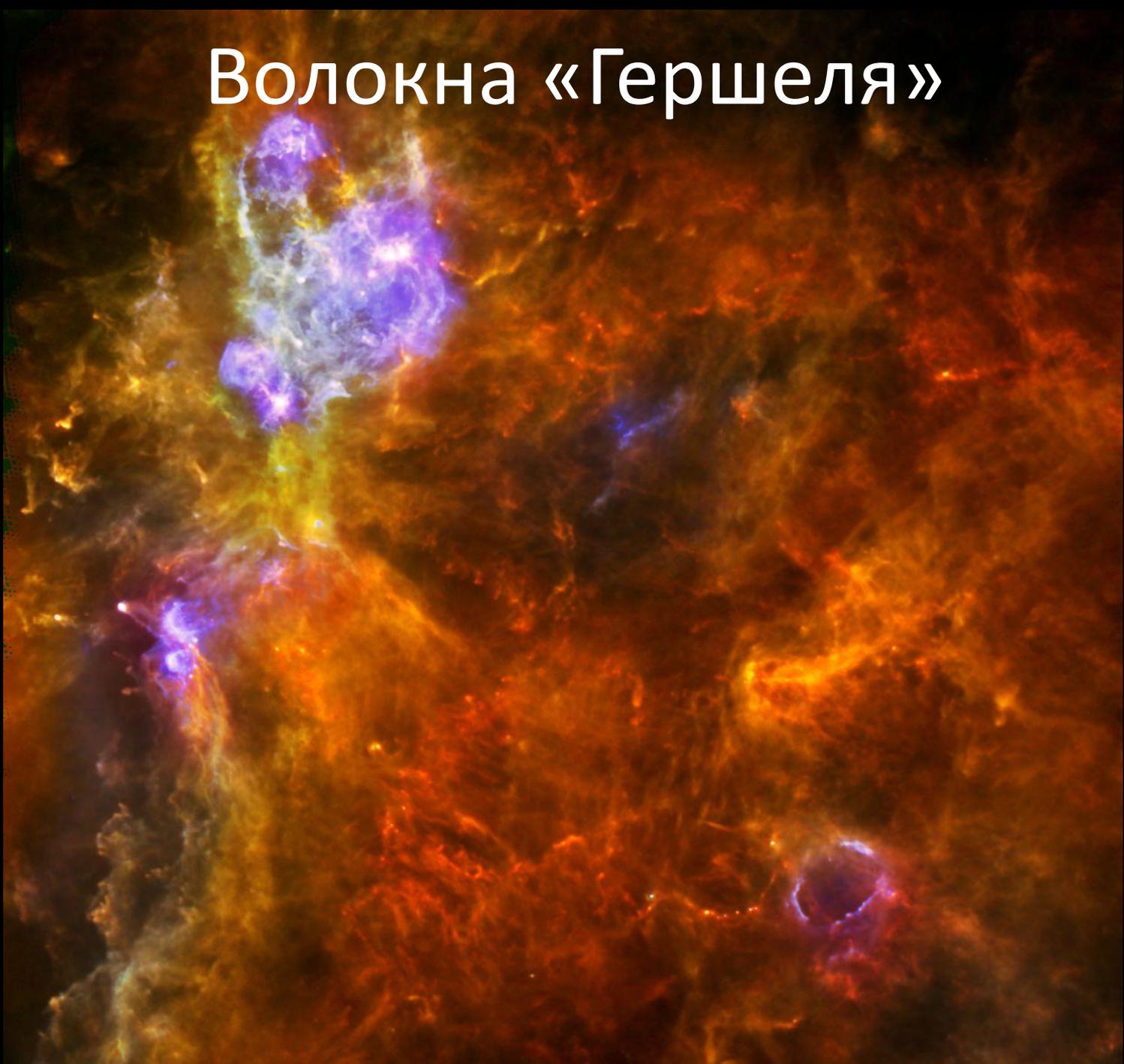
$$A_V = 0^m - 1^m$$

$$A_V = 1^m - 5^m$$

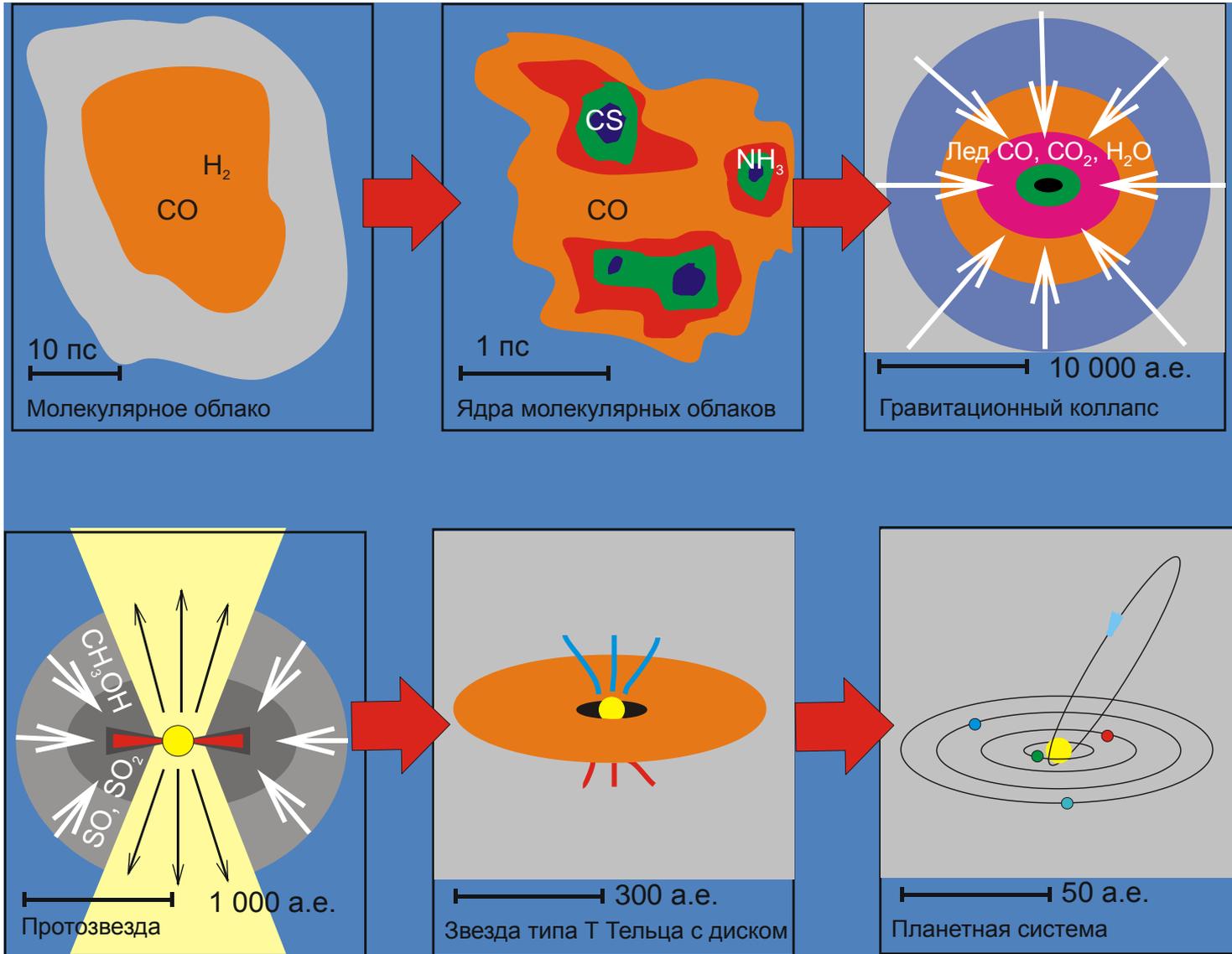
# Место рождения звёзд — молекулярные (газо-пылевые) облака



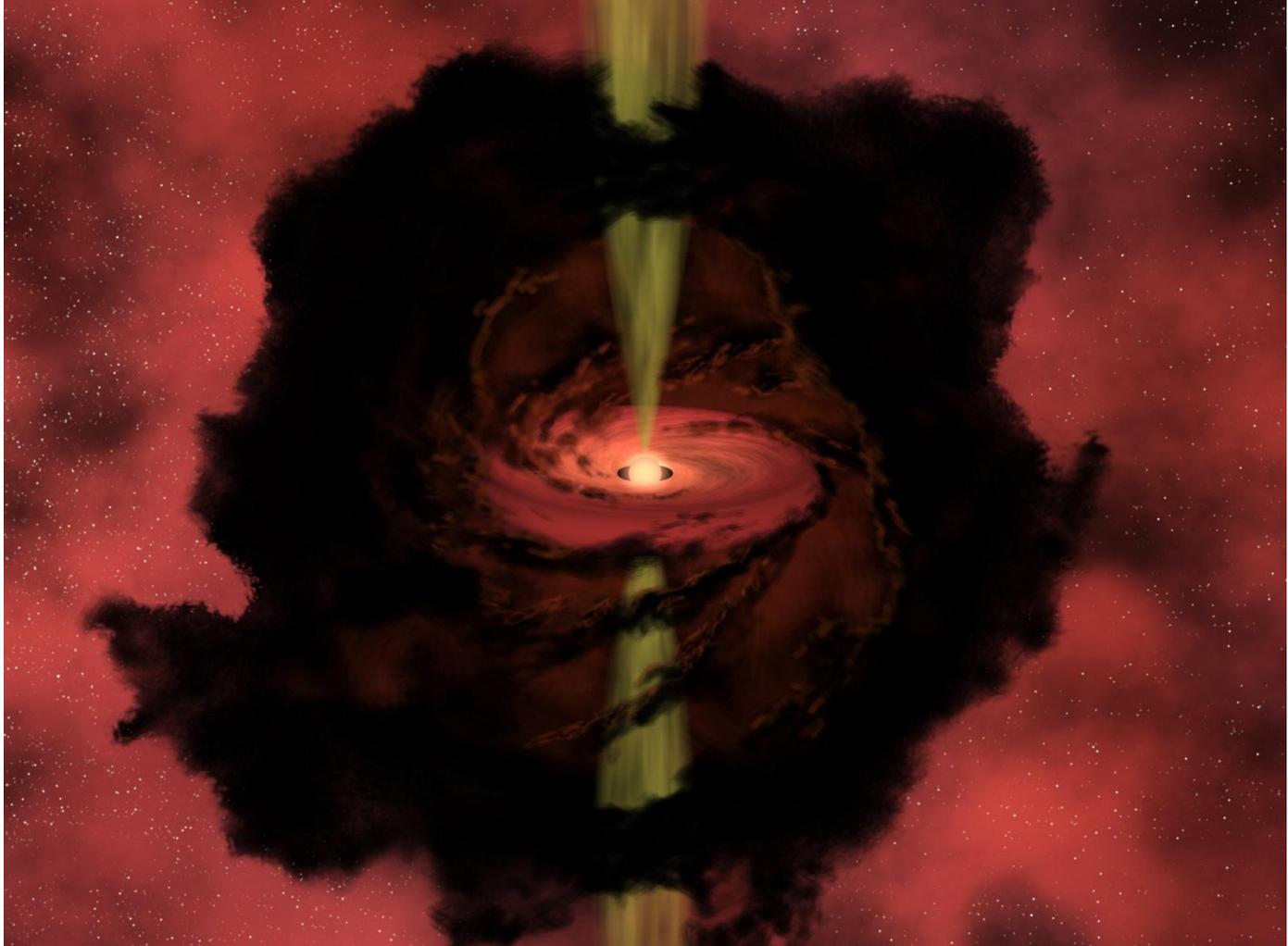
# Волокна «Гершеля»



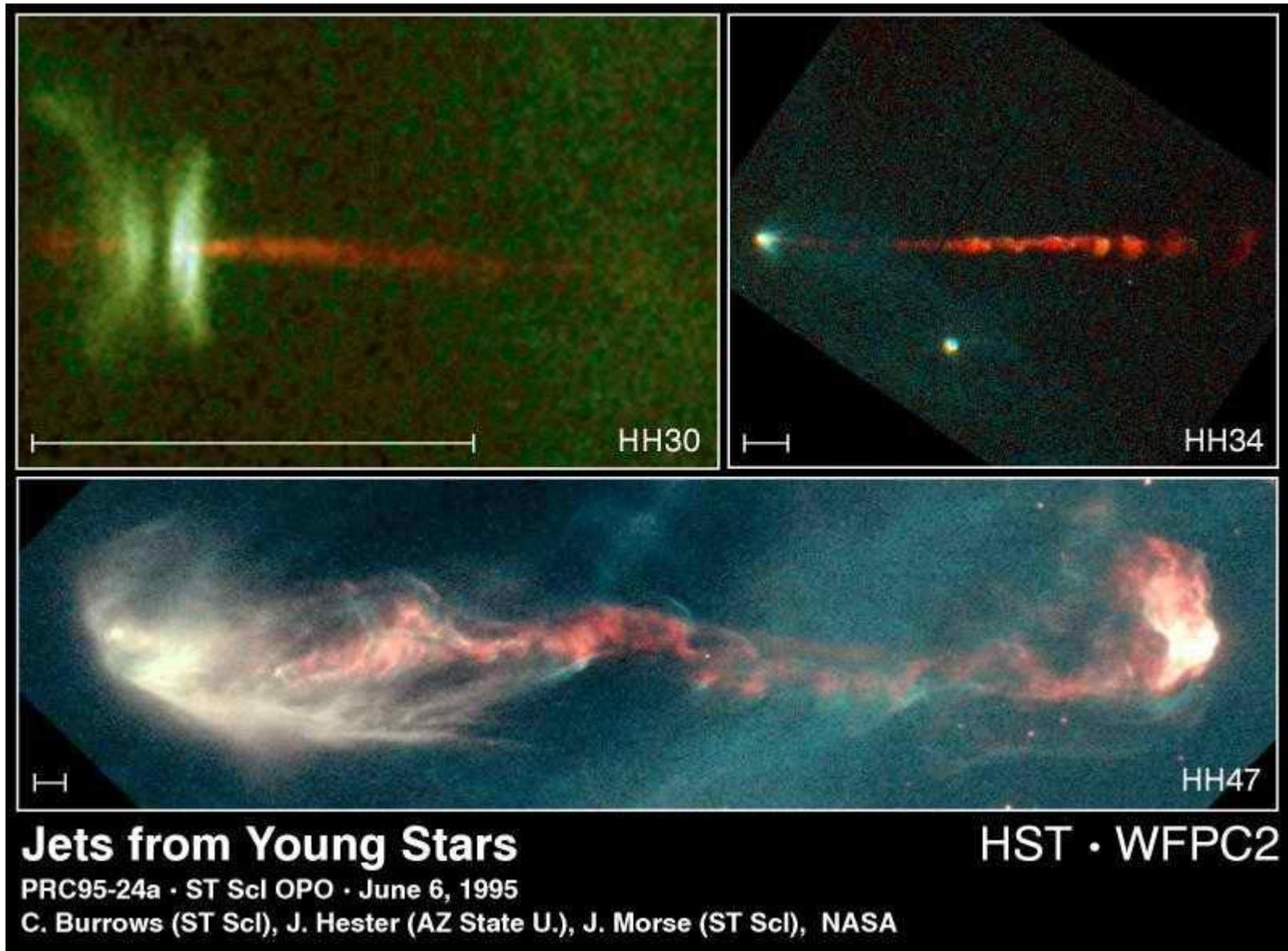
# Базовый сценарий звездообразования



# Формирование диска и джета



# Объекты Хербига-Аро

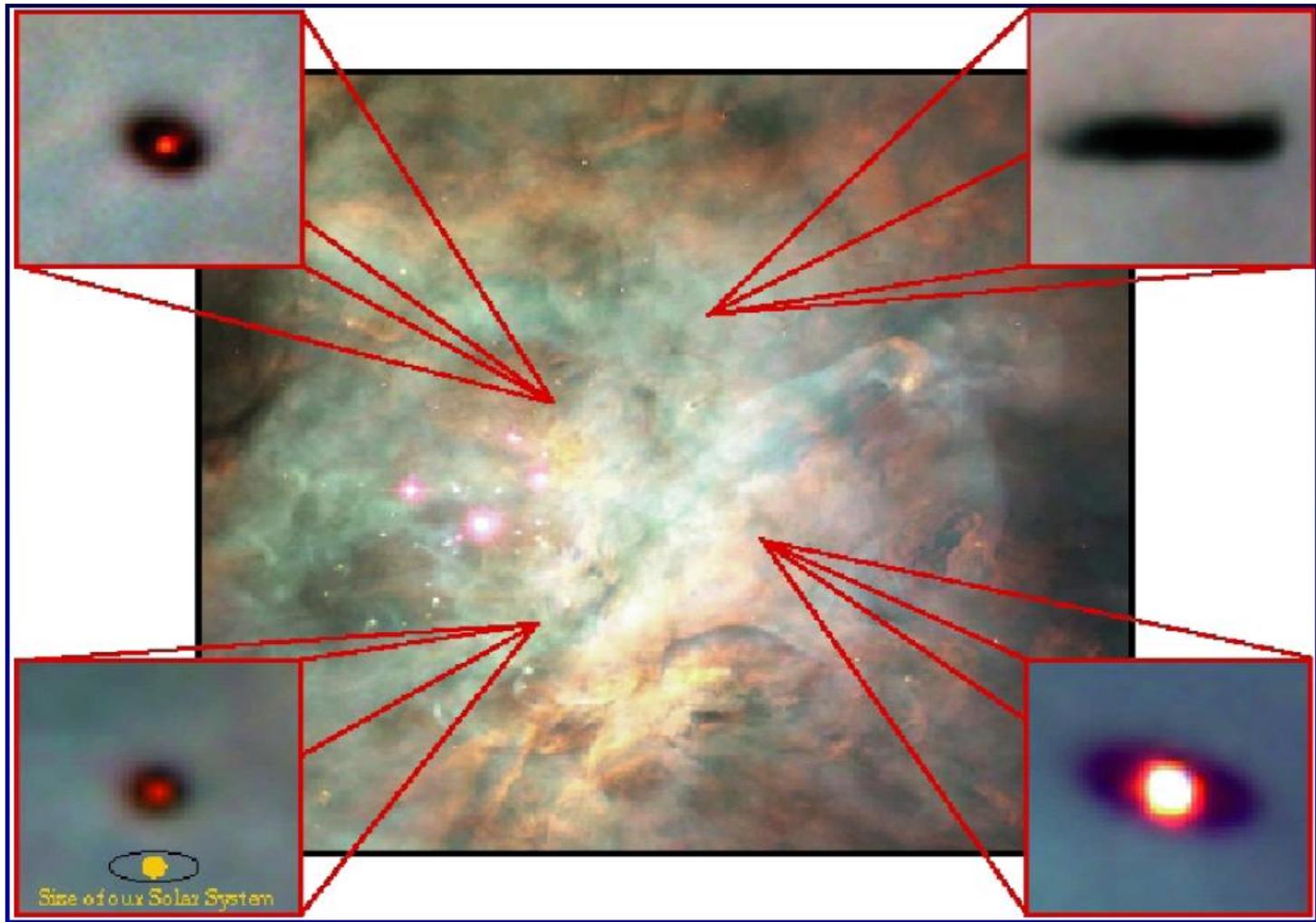


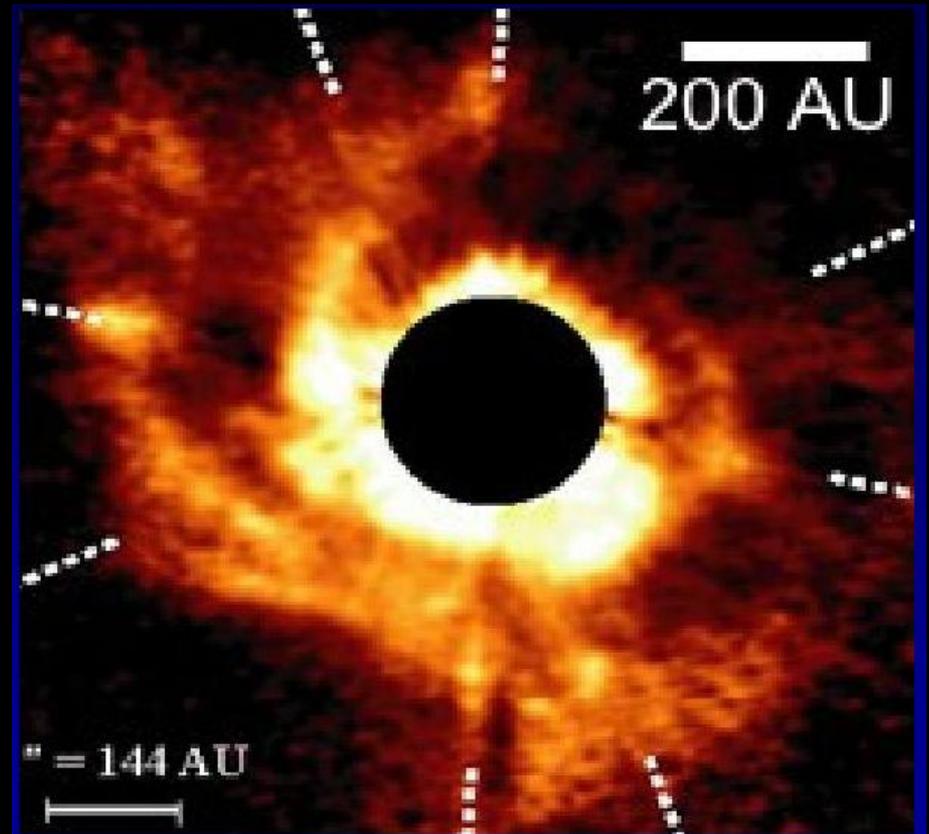
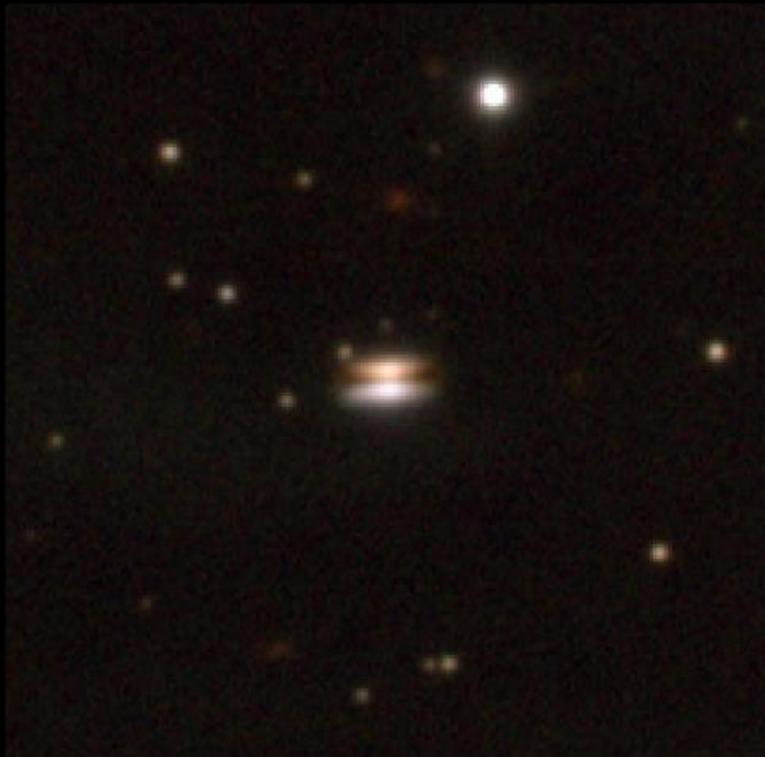
# HH 901 и HH 902

HH 901/902 • Hubble Space Telescope • WFC3/UVIS/IR

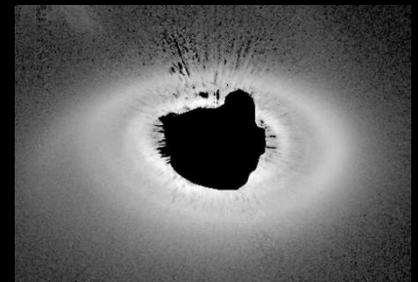


# Протопланетные диски

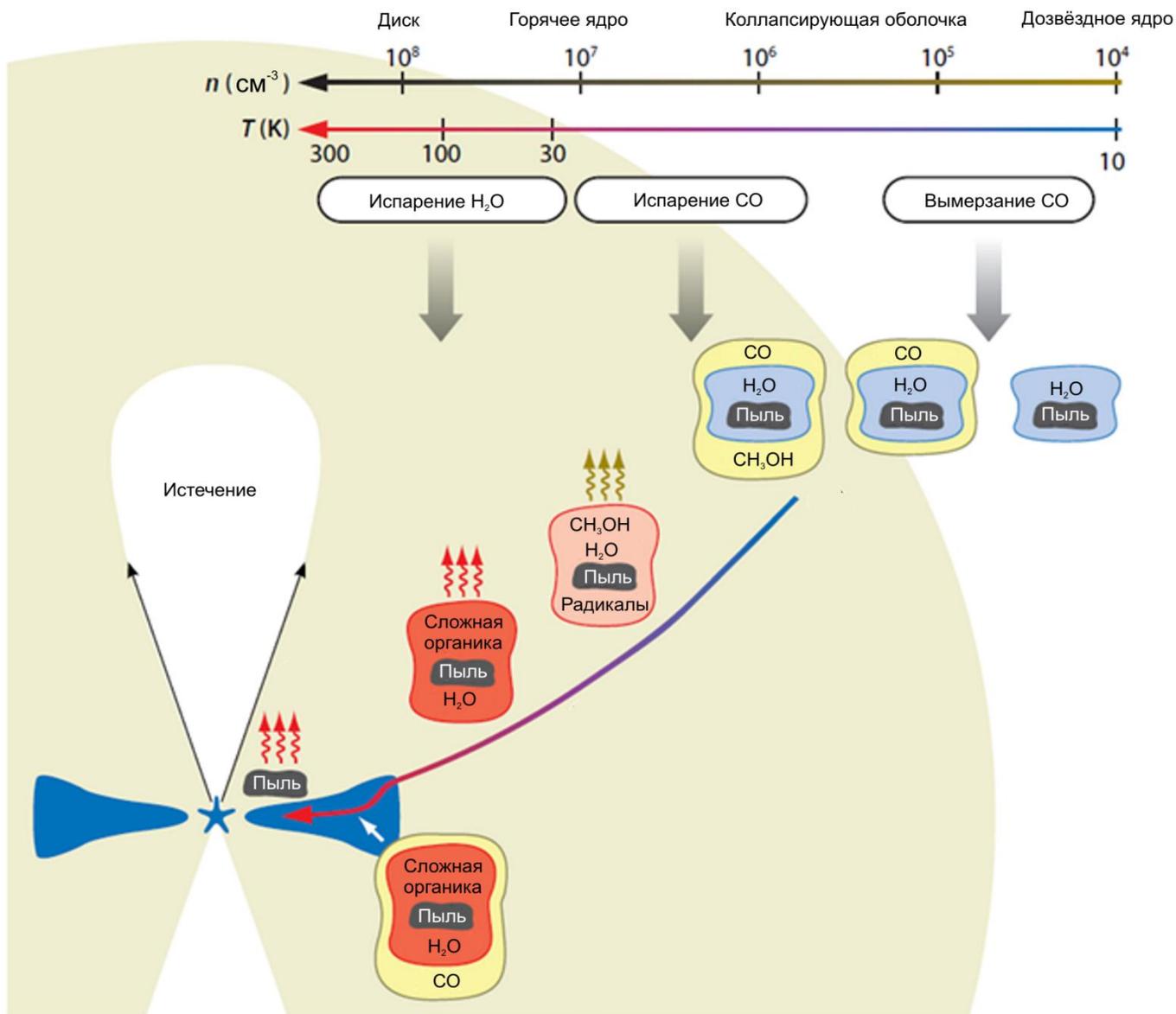




Fukagawa et al. 2004



# Попадают ли межзвёздные молекулы в протопланетные диски и планеты?



# Молекулы в протопланетных дисках

$\text{H}_2\text{O}$   $\text{HCN}$   $\text{NH}_3$   $\text{C}_2\text{H}$   $\text{HNC}$   $\text{CN}$   $\text{N}_2\text{H}^+$   $\text{HCO}^+$   
 $\text{CS}$   $\text{CO}$   $\text{H}_2\text{CO}$   $\text{CH}_3\text{OH}$   $\text{c-C}_3\text{H}_2$   $\text{HC}_3\text{N}$



# Выводы

- Органические соединения в изобилии присутствуют в межзвёздной среде.
- Реакции, ведущие к их синтезу, в общих чертах понятны.
- Попадают ли эти соединения в протопланетные диски и на формирующиеся планеты?