Моделирование образования сложных органических молекул в протопланетном диске

Кискин М. Ю., Васюнин А. И., Акимкин В. В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина
Институт естественных наук и математики

ИНАСАН Институт астрономии РАН

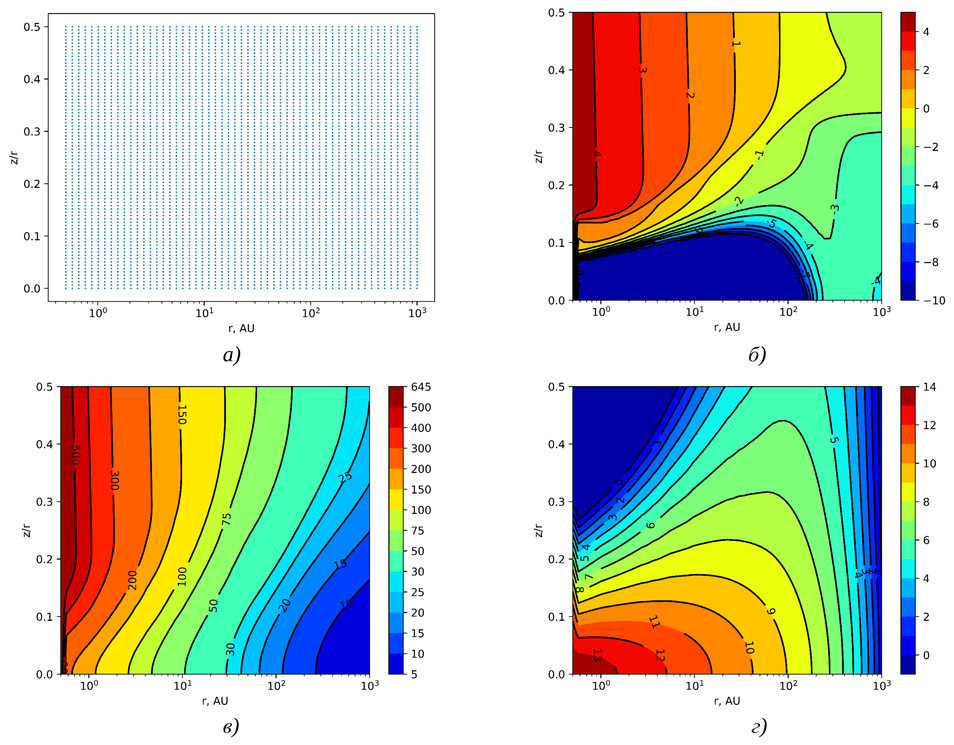
Введение

Протопланетные диски, богатые пылью и газом, являются местами образования планет и практически повсеместно встречаются вокруг молодых звезд. Понимание химического состава этих объектов имеет решающее значение для определения химического состава будущих экзопланет и более мелких объектов планетных систем, таких как астероиды и кометы. На сегодняшний день в протопланетных дисках обнаружены различные молекулы, в том числе метанол CH_3OH [1] и ацетонитрил CH_3CN [2,3]. Исследование химического состава в дисках вокруг солнцеподобных звезд позволит иметь представление о происхождении органических молекул в ранней Солнечной системе, что в свою очередь может служить ключом к пониманию раннего химического состава Земли и других планет.

Мы ставим своей целью разработать вычислительный код, способный эффективно рассчитывать эволюцию химического состава протопланетного диска, учитывая особенности его физических параметров и условий.

Физическая модель

Мы используем модель протопланетного диска вокруг звезды типа T Тельца с массой 1 $M_\odot$ и применяем 1+1D подход для расчета плотности и температуры диска [4]. Модель представляет собой сетку из 4400 точек (55 столбцов по 80 точек).



На графиках представлены: а) равномерное распределение точек сетки диска в координатах «радиус – высота» диска $\left(r, \frac{z}{r}\right)$; распределения б) интегрированного по длинам волн поля УФ-излучения в [эрг см$^{-2}$ с$^{-1}$], в) температуры газа в [К] и г) плотности газа в [см$^{-3}$] в тех же координатах [5]. На графиках б) и г) цветовая шкала обозначает десятичный логарифм.

Химическая модель

Химическая модель включает 670 реагентов и 6015 газофазных и поверхностных реакций, а также 198 реагентов и 880 реакций в ледяной мантии пылевых частиц, в зависимости от режима моделирования и основана на коде MONACO [6]. Особенностью химической модели является включение низкотемпературных химических процессов, приводящих к образованию сложных органических молекул (COM), применявшихся ранее в исследовании протозвездных облаков [7], с учетом полей излучения центральной звезды протопланетного диска и межзвездного излучения.

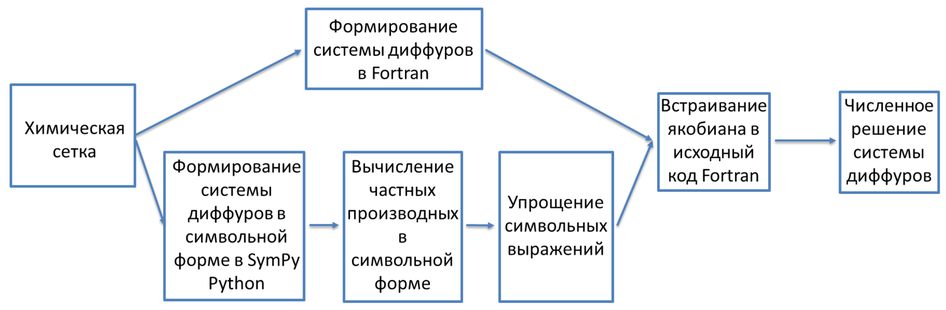
Моделирование

Эволюция химического состава рассчитывается с помощью численного интегрирования системы дифференциальных балансных уравнений скоростей реакций методом Адамса. Расчетное время интегрирования составляет 1 миллион лет. Численное интегрирование реализуется в коде MONACO на языке Fortran с помощью интегратора DVODE. Из-за больших различий в физических условиях по всему протопланетному диску расчет эволюции химического состава в различных точках сетки физической модели занимает различное количество процессорного времени, а в некоторых случаях может не завершаться успешно. Ожидается, что задание якобиана системы дифференциальных уравнений для численного интегратора должно повысить скорость и стабильность расчетов, а также их точность. На данный момент мы применили следующие режимы моделирования:

- Двухфазный (газ-поверхность) с учетом реактивной десорбции без задания якобиана
- Двухфазный с учетом реактивной десорбции и использованием якобиана
- Трехфазный (газ-поверхность-мантия) без якобиана
- «Неполный» трехфазный с заданием якобиана.

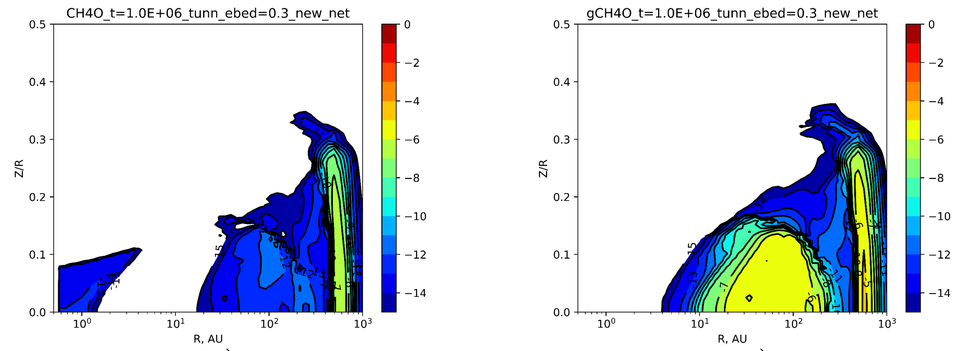
В трехфазном режиме изменение мантии происходит за счет адсорбции на поверхность, химических реакций и физической диффузии между мантией и поверхностью. В «неполном» трехфазном режиме диффузия не реализуется.

Якобиан системы дифференциальных уравнений определяется с помощью пакета символьных вычислений SymPy для языка Python. И процесс численного решения системы уравнений выглядит следующим образом:

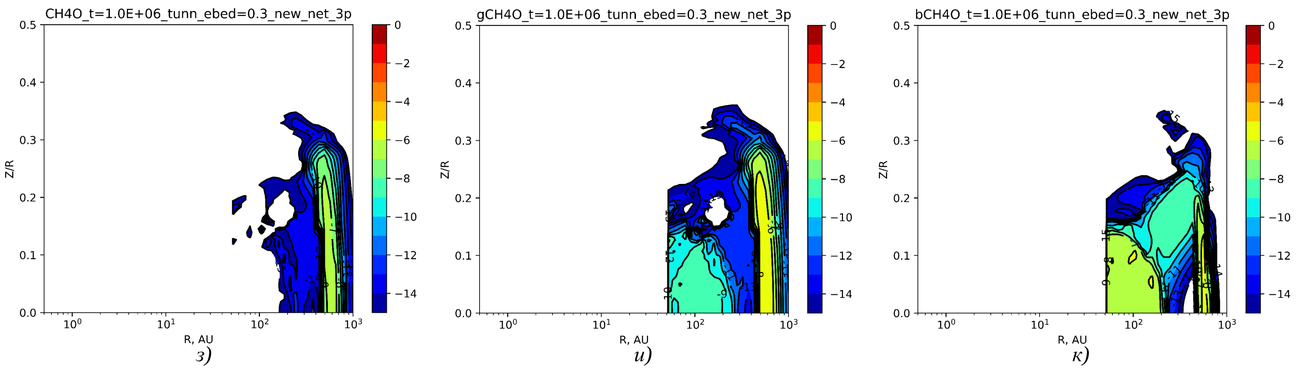


Результаты

После добавления якобиана к двухфазному режиму скорость расчетов увеличилась в среднем в 4-5 раз, а количество неуспешно завершенных расчетов сократилось в 150 раз. Ниже представлены двумерные распределения содержания метанола е) в газовой фазе и ж) на поверхности пыли относительно содержания ядер водорода по результатам расчетов двухфазного режима с якобианом на момент времени 1 миллион лет. Здесь и далее цветовая шкала обозначает десятичный логарифм.



В трехфазном режиме без якобиана расчеты для большинства точек сетки физической модели протопланетного диска не завершаются успешно за разумное процессорное время. На данный момент задание якобиана реализовано для трехфазного режима без физической диффузии. Время расчетов с добавлением третьей фазы, ожидаемо, больше, чем в двухфазном режиме, и на данный момент мы можем представить результаты расчетов этого режима для внешних областей диска. Ниже – распределение метанола з) в газовой фазе, и) на поверхности мантии и к) в мантии пылевых частиц для областей с радиальным расстояние от центральной звезды более 50 а. е.



Как можно заметить из графиков ж) и и), при добавлении третьей фазы содержание метанола на поверхности пыли для общих рассматриваемых областей диска в среднем сокращается, что разумно, т. к. молекулы теперь могут накапливаться в ледяной мантии (график к)). Поскольку теперь количество молекул доступных для десорбции с поверхности сокращается, то содержания в газовой фазе в трехфазном режиме в также уменьшается (графики е) и з)).

Задание якобиана системы дифференциальных уравнений при численном интегрировании повысило эффективность и скорость расчетов и позволит в дальнейшем применять более сложные модели при исследовании химической эволюции протопланетных дисков.

Список литературы

1. Walsh C. et al. First detection of gas-phase methanol in a protoplanetary disk //The Astrophysical Journal Letters. – 2016. – Т. 823. – №. 1. – С. L10.
2. Öberg K. I. et al. The comet-like composition of a protoplanetary disk as revealed by complex cyanides //Nature. – 2015. – Т. 520. – №. 7546. – С. 198-201.
3. Bergner J. B. et al. A Survey of CH3CN and HC3N in Protoplanetary Disks //The Astrophysical Journal. – 2018. – Т. 857. – №. 1. – С. 69.
4. Akimkin V. et al. Protoplanetary disk structure with grain evolution: The ANDES model //The Astrophysical Journal. – 2013. – Т. 766. – №. 1. – С. 8.
5. Molyarova T. et al. Gas mass tracers in protoplanetary disks: CO is still the best //The Astrophysical Journal. – 2017. – Т. 849. – №. 2. – С. 130.
6. Vasyunin A. I., Herbst E. Reactive desorption and radiative association as possible drivers of complex molecule formation in the cold interstellar medium //The Astrophysical Journal. – 2013. – Т. 769. – №. 1. – С. 34.
7. Vasyunin A. I. et al. Formation of complex molecules in prestellar cores: a multilayer approach //The Astrophysical Journal. – 2017. – Т. 842. – №. 1. – С. 33.