

Микроскопическое моделирование химических процессов на пылевых частицах



Медведев М.Г., Островский А.Б., Федосеев Г.С., Васюнин А.И.
Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
mikhail.medvedev@urfu.ru

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

ВВЕДЕНИЕ

В межзвёздной среде (МЗС), включающей регионы активного звездообразования, обнаружено более двухсот различных химических соединений. Считается, что поверхность пыли, повсеместно присутствующей в МЗС, играет ключевую роль как в образовании таких простых молекул как водород, формальдегид и метанол, так и более сложных молекул, включая органические соединения. При моделировании процессов, происходящих на поверхности пыли, необходимо учитывать дискретность событий, неоднородность поверхности пыли, локальное окружение для каждого атома или молекулы, находящихся на поверхности пыли. Этим требованиям отвечают методы численного моделирования, основанные на микроскопическом методе Монте-Карло. Возможность одновременного использования кода для численного моделирования результатов экспериментов позволяет осуществлять перекрёстную проверку лабораторно полученных астрохимических результатов (смотрите стендовый доклад Федосеева Г. С.).

МЕТОДИКА

Мы используем микроскопический метод Монте-Карло с применением случайных блужданий (Continuous time random walk). В нашей модели пылинка представляет собой трёхмерную периодическую сеточную структуру на основе гексагональной плотной упаковки равных сфер. Для упрощения вычислений мы представляем каждый слой ледяной мантии пылинки плоским с периодическими граничными условиями.

На данный момент в модель уже включено четыре основных процесса:

- адсорбция частиц из газа на поверхность пыли,
- десорбция с поверхности пыли в газ,
- диффузия частиц на поверхности пыли,
- реакция между частицами на поверхности пыли.

Алгоритм работы модели:

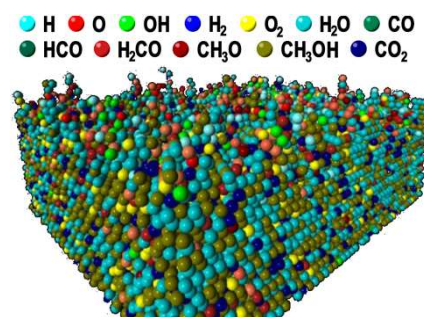
1. Задаем сетку реакций, параметры пылинки, температуру и другие параметры модели;
2. Вычисляем время ожидания WT для каждого возможного события для каждой спещи по формуле:

$$WT = -\frac{\ln(X)}{b},$$

где X – равномерно распределенная случайная величина от 0 до 1, b – скорость протекания процесса; Рисунок 1 – Визуализация ледяной мантии пылинки

3. Находим наименьшее время ожидания из полученных на втором шаге и реализуем событие, соответствующее этому времени ожидания;

4. Пересчитываем скорости процессов, которые должны измениться в результате реализованного на третьем шаге события, и далее переходим ко второму шагу, а часы модели сдвигаются вперед на величину, соответствующую времени ожидания реализованного события.



РЕЗУЛЬТАТЫ

При моделировании использовалась простая сетка из 10 реакций, связывающих 4 из 7 наиболее распространённых молекул в ледяных мантиях. В таблице 1 приведены энергии активации для медленных реакций, нуждающихся в преодолении активационного барьера, взятые из [1]. На рисунках 1, 2 приведен визуализированный пример результата моделирования, образуется неровная поверхность с углублениями и небольшими возвышенностями, а также в толще присутствуют пустоты. На рисунке 3 приведена зависимость удельных концентраций от времени, преимущественно лёд состоит из воды (H_2O), метанола (CH_3OH) и диоксида углерода (CO_2), что в целом согласуется с ожиданиями от неполной сетки реакций и результатами экспериментов [2]. На следующем этапе работы планируется достичь согласования результатов численного моделирования с результатами астрономических наблюдений [3] за счёт увеличения сетки реакций и использования активационных энергий, соответствующих результатам современных экспериментальных и теоретических изысканий.

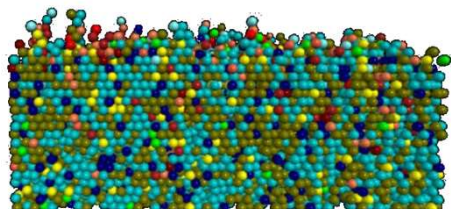


Рисунок 2 – Визуализация ледяной мантии пылинки

Таблица 1 – Энергии активации для реакций с барьером

Реакция	E_{act} , K
$H + CO \rightarrow HCO$	390
$H + H_2CO \rightarrow H_3CO$	415
$O + CO \rightarrow CO_2$	1000

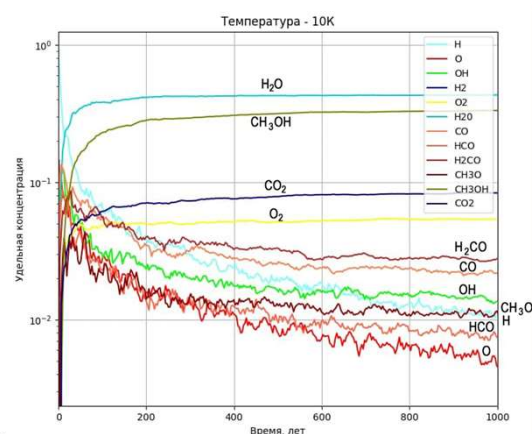


Рисунок 3 – Зависимость удельной концентрации от времени. Температура 10 K. Время моделирования 1000 лет

ВЫВОДЫ

- Написан вычислительный код на языке Fortran, симулирующий протекание химических процессов на поверхности пылевой частицы.
- Для ускорения вычислений использована библиотека OpenMP, позволяющая производить параллельные вычисления.
- Показаны результаты работы модели с упрощённой сеткой из 10 реакций, связывающих 4 из 7 наиболее распространённых молекул в ледяных мантиях.
- Результаты численного моделирования, а именно образования H_2O , CH_3OH и CO_2 , качественно соответствует результатам экспериментальных и теоретических работ доступных из литературы.

[1] Cuppen H. M., van Dishoeck E. F., Herbst E., Tielens A. G. G. M. 2009, Astron. Astrophys., 508, 1, 275

[2] Linnartz H., Ioppolo S., Fedoseev G., 2015, Int. Rev. Phys. Chem., 34, 205

[3] Boogert A. C. A., Gerakines P. A., Whittet D. C. B. 2015, Annu. Rev. Astron. Astrophys, 53, 541