

# Трёхмерное моделирование образования молекулярного водорода на поверхности межзвездной пылевой частицы бессеточным методом Монте-Карло

Сатонкин Н.А., Островский А.Б., Kalnin K., Федосеев Г.С., Васюнин А.И.

## Задача

Создание кода численного моделирования химической эволюции межзвездной среды (МЗС) на основе метода микрокопического бессеточного (off-lattice) Монте Карло. Исследование зависимости эффективности механизмов рекомбинации молекулярного водорода от температуры.

## Введение

Исследование химических процессов на поверхности межзвездной пыли важно для понимания процессов формирования и обогащения молекулярного состава межзвездной среды. Простейшая и наиболее распространенная молекула  $H_2$  образуется на поверхности частиц космической пыли из атомарного водорода, и затем десорбируется в газовую фазу, где участвует в различных реакциях, увеличивая химическое разнообразие газовой фазы. Для полного понимания механизма образования молекул на частицах межзвездной пыли необходимо иметь представление о морфологии этих частиц. Построение приближенной к реальности модели пылевой частицы и химических реакций на ней можно реализовать с помощью различных методов. Одними из самых распространенных являются методы балансных уравнений. Они позволяют быстро рассчитать макроскопическую химическую эволюцию системы, но при этом с их помощью невозможно отследить микрокопические неоднородности поверхностей пылевых частиц. Стохастический микрокопический точный кинетический метод Монте-Карло является более медленным, но в отличие от методов балансных уравнений, позволяет отследить положения конкретных атомов и молекул на поверхности пылинки. Существуют две основные вариации этого метода: сеточный и бессеточный. Сеточный предполагает разбиение поверхности пылинки на одинаковые области, а в случае бессеточного подхода рассчитывается сплошное потенциальное поле, в котором перемещаются частицы. В данной работе с использованием бессеточного метода Монте-Карло моделируется эволюция пылевой частицы и исследуется эффективность рекомбинации молекулярного водорода при различных температурах пыли. Используется заранее сгенерированное углеродное ядро, на которое аккрецируются атомы водорода.

## Алгоритм

В работе реализуется трёхмерное моделирование эволюции межзвездной пылевой частицы с углеродным ядром в окружающем газе с учётом процессов десорбции и аккреции. Базой для метода служит алгоритм Gillespie (1977).

- Шаг 0 (предварительный): Задание начальных условий и формирование ядра пылевой частицы.
- Шаг 1: Расчёт времён для событий посредством генератора случайных чисел (H. M. Cuppen and R. T. Garrod 2011), выбор наименьшего времени.
- Шаг 2: Действия на этом шаге зависят от результата предыдущего.
  - Происходит аккреция.
  - Происходит десорбция.
  - Происходит квантовое туннелирование.
  - Происходит тепловая миграция.

В дальнейшем шаги 1 и 2 повторяются до тех пор, пока не будет достигнуто выставленное ограничение по времени.

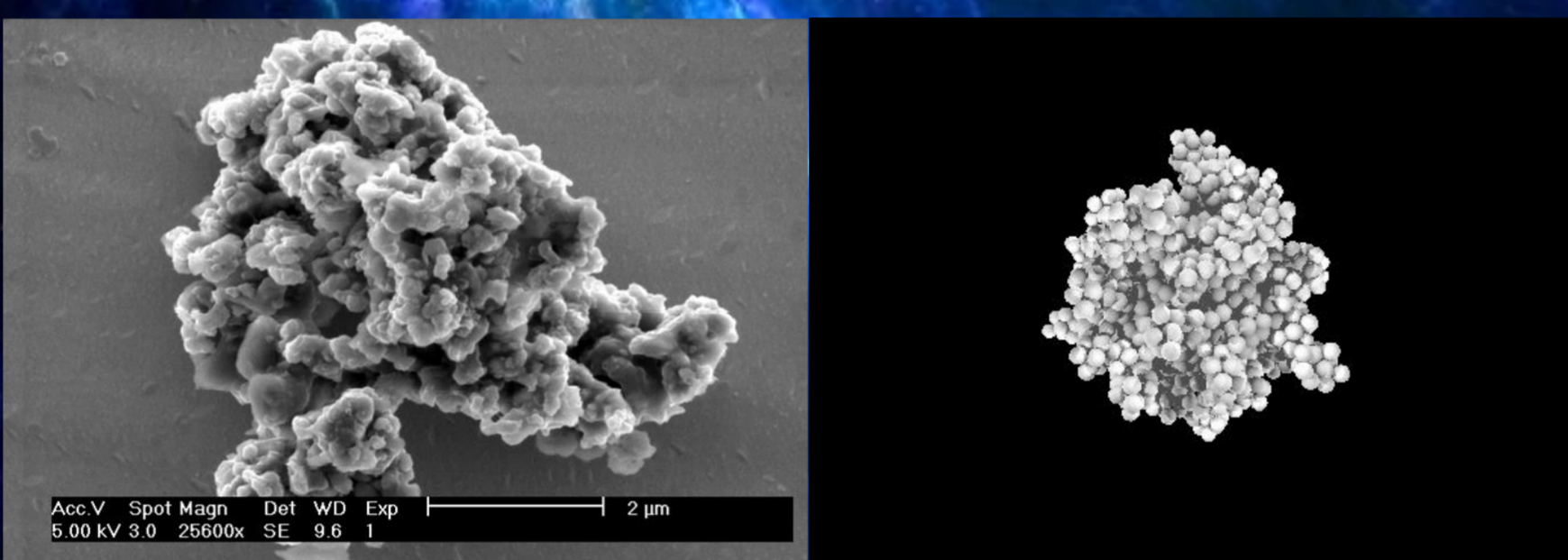


Рисунок 1. Пример реальной пылевой частицы.

Рисунок 2. Модельное ядро пылевой частицы.

## Начальное ядро

Начальное ядро (рисунок 2) формируется путём произвольного аккрецирования атомов углерода на единственный начальный атом. При этом используются те же механизмы аккреции и вычисления расположения потенциальных ям, что и при обычной аккреции в течении работы кода.

## Механизмы рекомбинации водорода

Рекомбинация водорода на поверхности пылевой частицы может происходить с помощью разных механизмов, таких как прямая аккреция одного атома на другой (Эйли-Ридила), аккреции атома водорода на пылинку с последующим скатыванием в ближайшую потенциальную яму с другим атомом водорода (Харриса-Касемо) и тепловая миграция или туннелирование атомов водорода находящихся в термическом равновесии с системой (Ленгмюр-Хиншельвуд). Статистика по эффективности всех этих механизмов собиралась в течении работы кода.

На рисунке 4 можно заметить, что после 9 К тепловая миграция становится преобладающим механизмом образования молекулярного водорода. Механизм квантового туннелирования перестаёт вносить вклад в образования водорода при температуре 17-18 К. Как видно на рисунке, механизм прямой аккреции оказывает слабое влияние на результат рекомбинации, почти полностью теряя и без того невысокую эффективность, уже при 10-12К. На температурах 28К и более график не информативен, так как количество рекомбинаций резко снижается и пронаблюдать достаточно событий для оценки механизмов рекомбинации не представляется возможным.

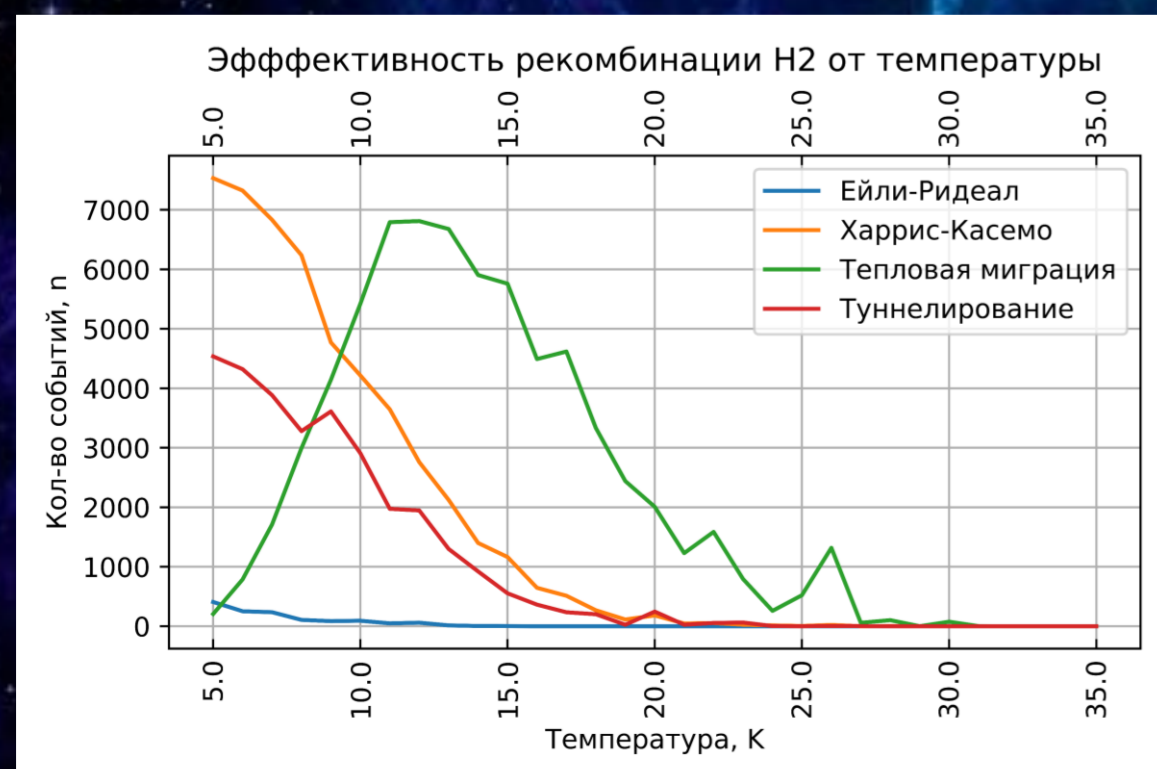


Рисунок 4. Эффективность механизмов рекомбинации водорода в зависимости от температуры.

## События

В системе 4 вида равноправных событий, - аккреция, десорбция, квантовое туннелирование и тепловая миграция.

### Аккреция

Координаты прилипания выбираются случайным образом так, чтобы спроецироваться на произвольную точку поверхности единичной сферы, после чего производится посадка атома в ближайший локальный минимум.

### Десорбция

При десорбции атом уничтожается (переходя в газовую фазу он естественным образом исчезает с пылинки и дальше его фиксировать нет необходимости) со всеми своими параметрами. Для связанных с ним атомов пересчитывается скорость десорбции и потенциальные точки миграции в области.

### Миграция

В модели работает два возможных механизма миграции: за счёт квантового туннелирования и за счёт тепловых прыжков. Каждый атом, находящийся в потенциальной яме на поверхности, имеет возможность мигрировать в соседние потенциальные ямы одним из этих двух способов. Для этого в радиусе  $2.5 \cdot \sigma_H$  ( $\sigma_H = 2.12 \text{ \AA}$ ) осуществляется поиск свободных потенциальных ям. Для каждой найденной потенциальной ямы рассчитывается расстояние до неё, глубина, скорость миграции тепловой миграции  $k_{hop}$  и скорость туннелирования  $k_{tun}$ . При любом изменении положения атома на поверхности заново выполняется поиск потенциальных ям для этого атома и всех атомов затронутых изменением.

## Потенциал

Все атомы и молекулы системы представлены в виде шаров различного диаметра и имеют собственный потенциал, рассчитываемый по формуле Леннард-Джонса:

$$U(r) = 4 * \epsilon * \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (9)$$

Вместе атомы образуют потенциал поверхности пылевой частицы. Потенциал в каждой точке поверхности рассчитывается как суперпозиция потенциалов атомов в радиусе  $2.5 \cdot \sigma_{max}$ . За  $\sigma_{max}$  принята максимально возможная  $\sigma$  в системе.

При аккреции атома на пылинку он сдвигается из сгенерированных координат в ближайшую область с наименьшим потенциалом.

## Образование молекулярного водорода

В данный момент реакция образования молекулярного водорода в модель введена следующим образом: образование связи между двумя любыми атомами водорода сразу генерирует событие образования молекулярного водорода, при этом благодаря экзотермичности реакции считается, что образованная молекула водорода сразу покидает пылинку.

## Потенциальные ямы

Для каждого моделирования собралась статистика глубин потенциальных ям, которые занимали атомы водорода на поверхности пылевых ядер и события попадания в эти ямы. Пример подобной статистики представлен на рисунке 3.

Как видно на графике основной пик приходится на диапазон от 520К до 700К, но наблюдается значительное кол-во попаданий в более глубокие ямы, что при повышении температуры позволяет сохранять эффективность протекания процессов рекомбинации.

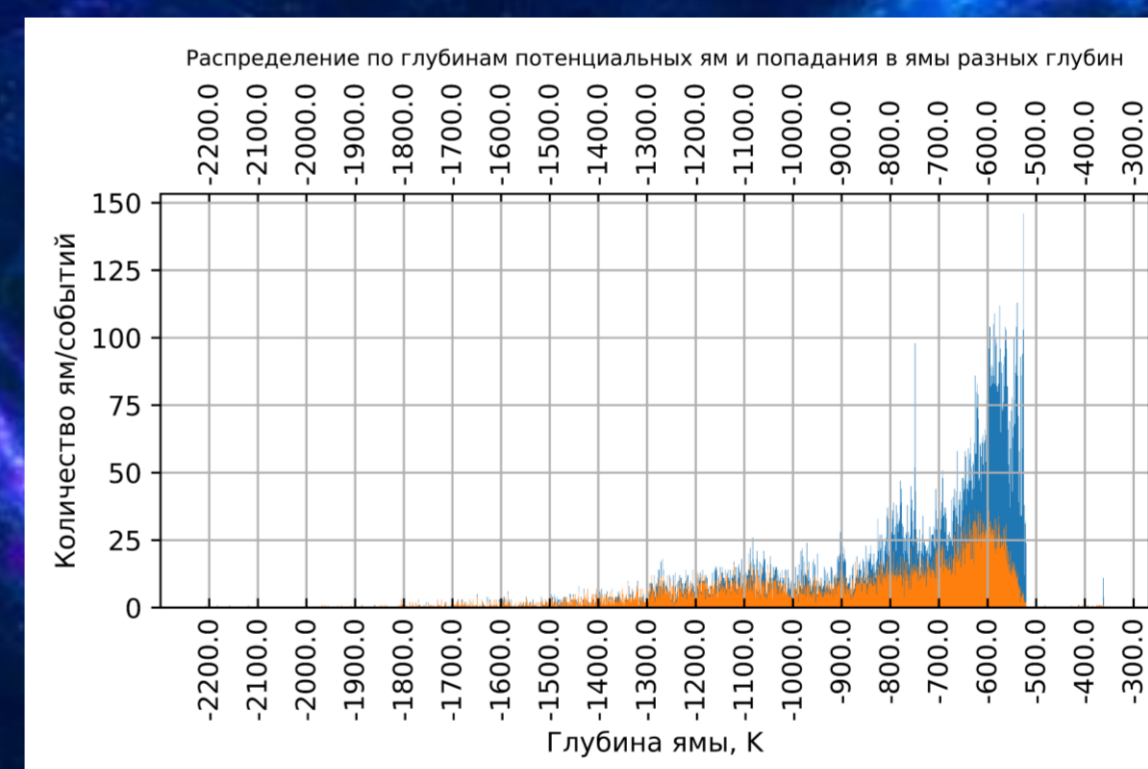


Рисунок 3. Вид распределения по глубинам потенциальных ям в которые попадали атомы водорода. Оранжевым цветом обозначены потенциальные ямы, синим – попадания в потенциальные ямы указанных глубин.

## Эффективность рекомбинации $H_2$

Результатом работы модели является кривая эффективности рекомбинации молекулярного водорода в зависимости от температуры. На рисунке 5 представлена кривые эффективности при концентрации атомарного водорода  $n = 3 \text{ см}^{-3}$ .

Видно, что благодаря неоднородности морфологии пылевой частицы молекулярный водород может достаточно эффективно образовываться при температуре 20К, что может объяснить его образование в регионах звездообразования с повышенными температурами, такими как диффузные облака и протопланетные диски.



Рисунок 5. Эффективность рекомбинации водорода в зависимости от температуры.

## Литература

- Tielens A. G. G. M., The physics and chemistry of the interstellar medium. New York : Cambridge University Press - 2005.
- R. T. Garrod Three-Dimensional, off-lattice Monte-Carlo kinetics simulations of interstellar grain chemistry and ice structure // The Astrophysical Journal - 2013
- D. T. Gillespie Exact Stochastic Simulation of Coupled Chemical Reactions // The Journal of Physical Chemistry - 1977
- H. M. Cuppen and R. T. Garrod Modelling of surface chemistry on an inhomogeneous interstellar grain // Astronomy & Astrophysics - 2011