

Химические трансформации в межзвездных облаках при прохождении через ударную волну

Любимов В.Н., Еремин М.А., Васильев Е.О.

Волгоградский государственный университет, Волгоград,
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

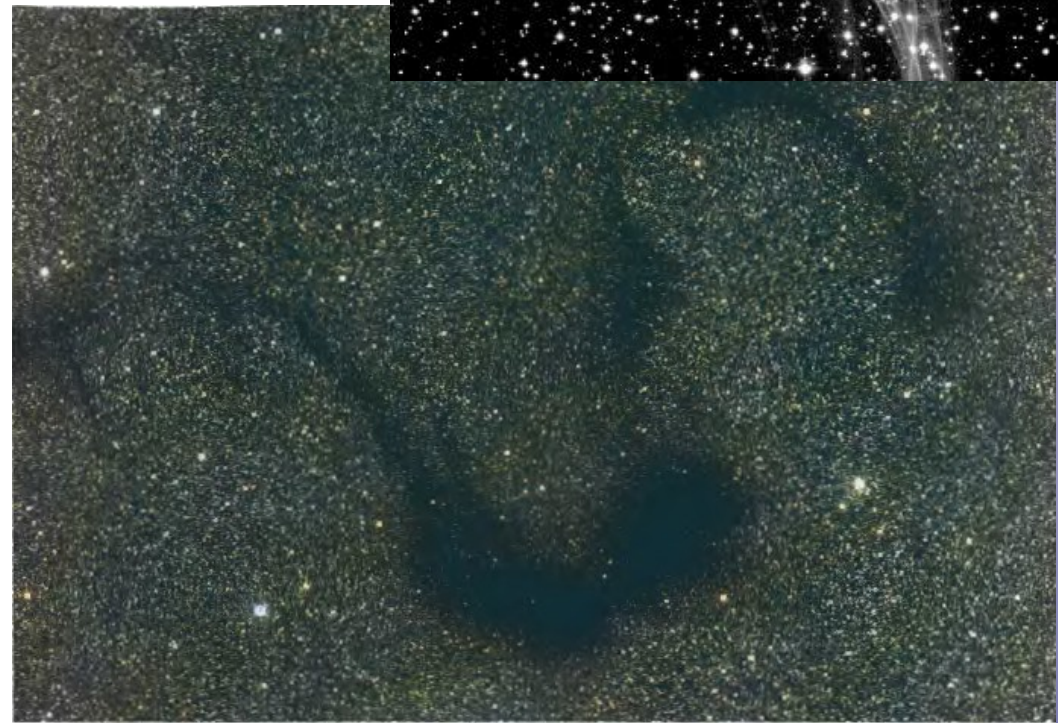
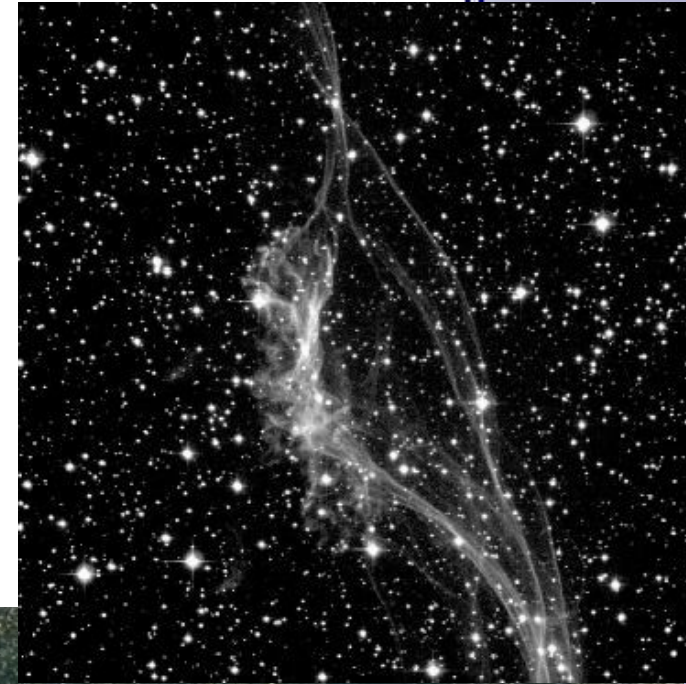
Межзвездная среда

Большая часть вещества МЗС находится в холодных сгустках – облаках. Для описания эволюции МЗС важно **описание эволюции облаков**.

Значительное влияние на химическую и динамическую эволюцию межзвездных облаков может оказывать их **взаимодействие с галактическими ударными волнами**.

Важен **учет химических реакций**, так как они могут оказывать сильное влияние на динамику межзвездных облаков и их остатков.

“Разобраться в событиях, происходящих в молекулярных облаках, по наблюдениям молекул невозможно без построения химической модели”
(Д. Вибе)



Цель

- Создание кода для численного моделирования процессов газодинамики в астрофизике с учетом химических реакций
- Численное моделирование взаимодействия межзвездных облаков с галактической ударной волной с учетом химических процессов.

Реализованный код

Для моделирования физико-химической эволюции процессов в межзвездной среде нами был разработан и реализован параллельный трехмерный численный код **AstroChemHydro**:

- **Явная численная конечно-объемная схема** для уравнений газовой динамики, описывающая течение **смеси идеальных химически взаимодействующих газов**.
- Химическая кинетика межзвездного газа включает **11 компонент** и **26 реакций**.
- В уравнении для энергии были учтены **процессы радиационных потерь**, характерные для межзвездного газа [4].
- Для решения уравнений химической кинетики использовался стандартный пакет для систем обыкновенных дифференциальных уравнений **DVODE**.
- Для распараллеливания численного кода использовалась разработанная нами библиотека **MPIParallel3D**.
- Расчеты проводились на сетке с разрешением **900x700 ячеек**.

11 компонент, 26 реакций

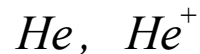
Водородная группа

Компоненты:

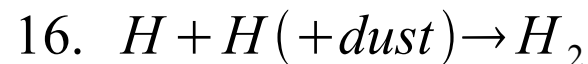
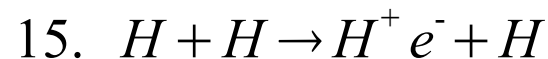
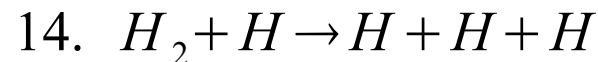
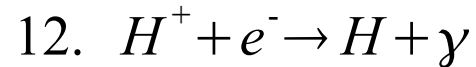
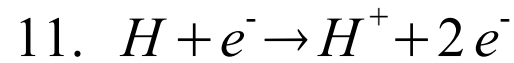
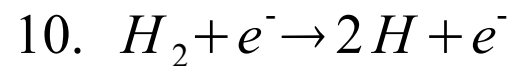
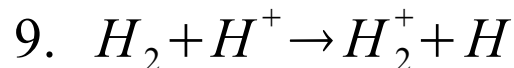
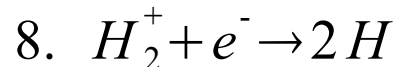
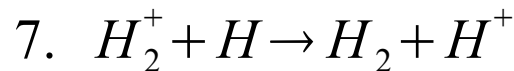
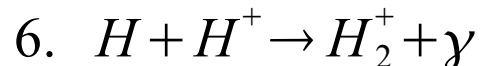
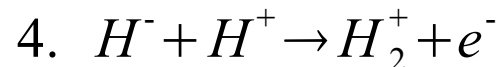
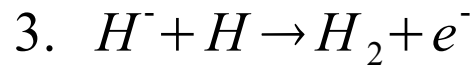
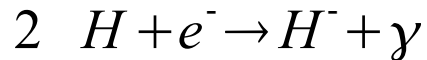
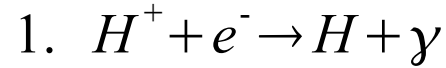
- водородные:



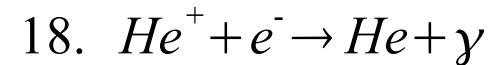
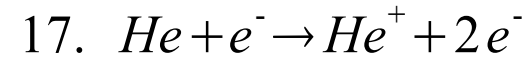
- гелиевые:



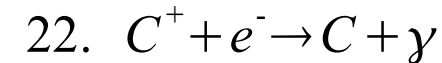
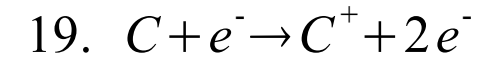
- металлы:



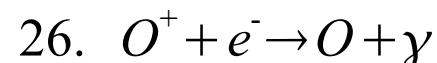
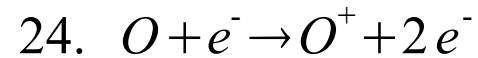
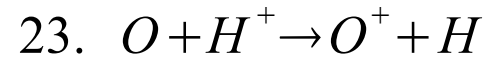
Группа гелия



Группа углерода



Группа кислорода



Вклад химии в динамику газа

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \times \mathbf{u}) = -\nabla p$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ([E + p] \mathbf{u}) = \Gamma(T)n - \Lambda(T)n^2$$



Основное влияние на динамику химические реакции оказывают за счет вклада в тепловой баланс среды. Химические реакции являются эффективным инструментом отвода тепла, или же источником нагрева среды.

Процессы охлаждения

Водород

- столкновительная ионизация
- рекомбинация
- столкновительное возбуждение

Гелий

- столкновительное возбуждение
- столкновительная ионизация
- радиативная и диэлектронная рекомбинация
- свободно-свободные переходы [Сеп (1992)]

Охлаждение на молекулярном водороде

- вращательно-колебательные переходы [2,4]
- столкновительная диссоциация с атомами H ($H_2 + H \rightarrow 3 H$)

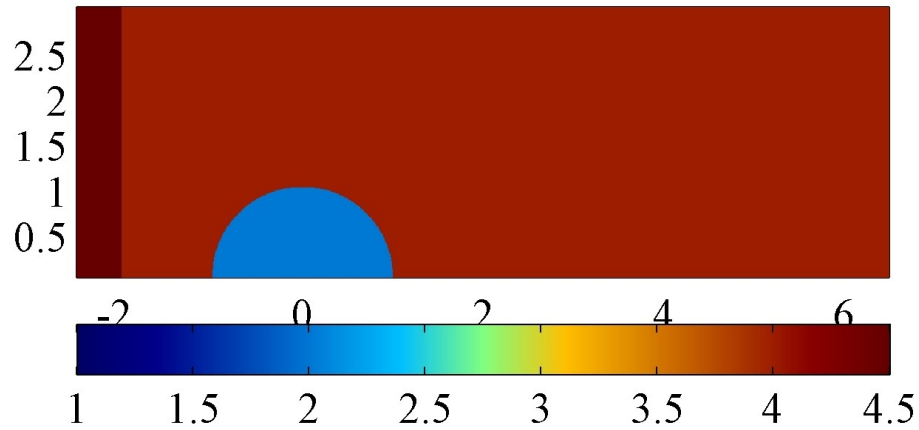
Охлаждение на металлах [4]

- при метастабильных переходах (CII – 2326A, OI - 6300A)
- при переходах в тонкой структуре (CI, CII, OI)

Параметры моделей

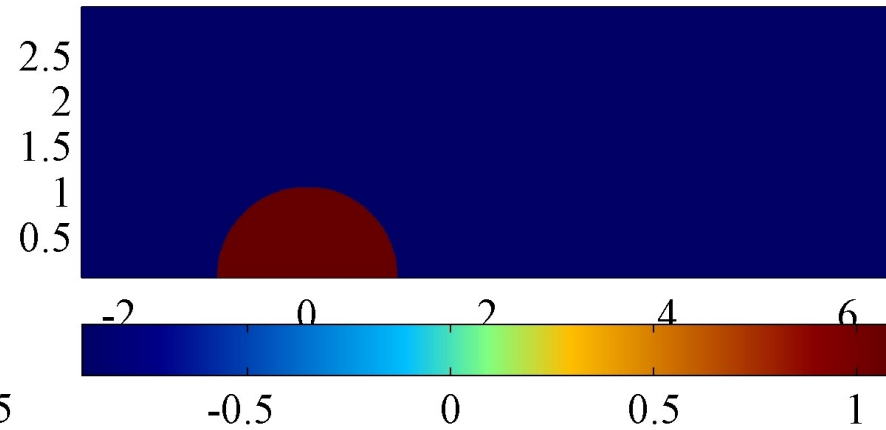
температура

$\lg[T(x,y)], t=0.00$



плотность

$\lg[\rho](x,y), t=0.00$



Начальное распределение

Межзвездная среда:

- температура – 10 000 К
- концентрация – 0.1 (1/см)

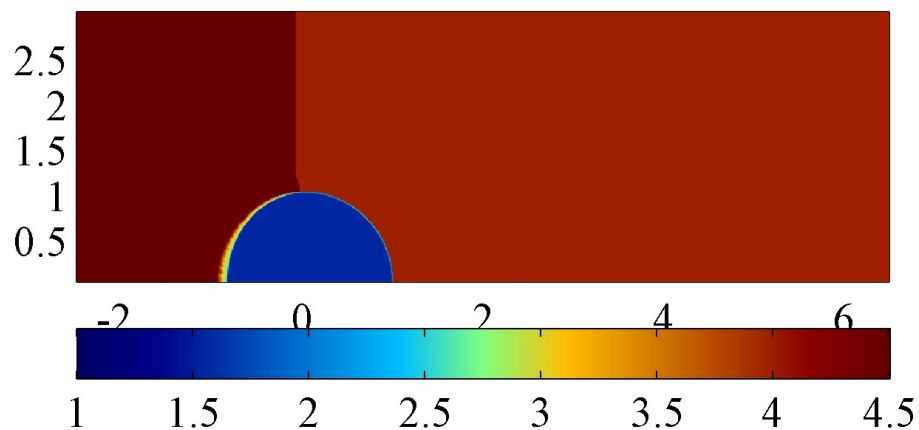
Облако:

- температура – 100 или 1000 К
- концентрация – 10 или 1 (1/см)
- радиус – 1 пк

Модель 1 – облако 100К

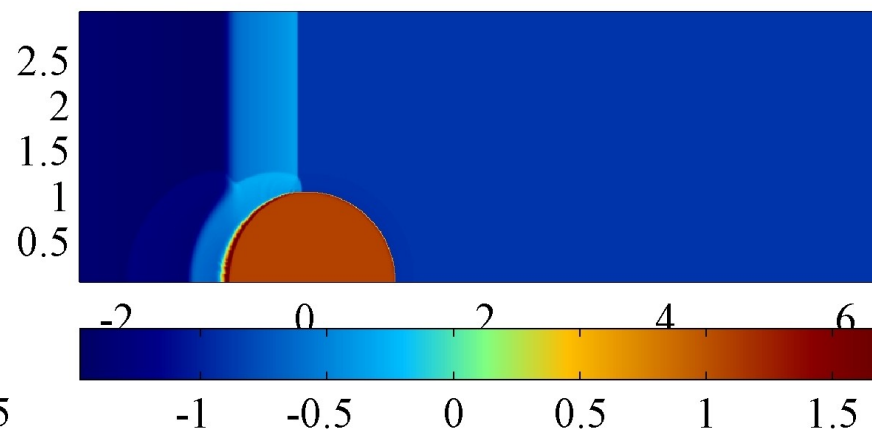
температура

$\lg[T(x,y)], t=0.25$



плотность

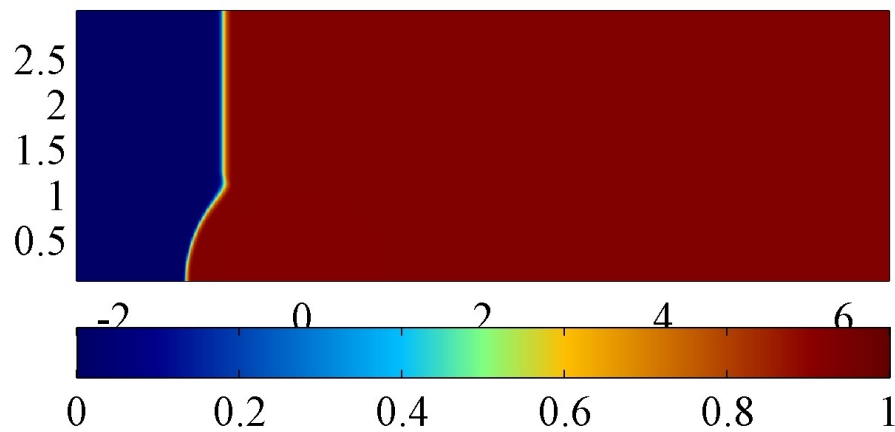
$\lg[\rho](x,y), t=0.25$



Относительные концентрации

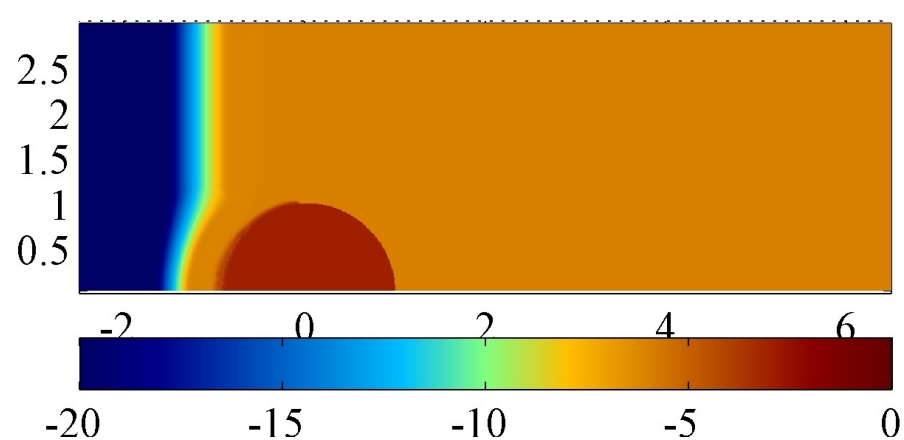
HI

$n(\text{H})/n(x,y), t=0.25$



молекулярный водород

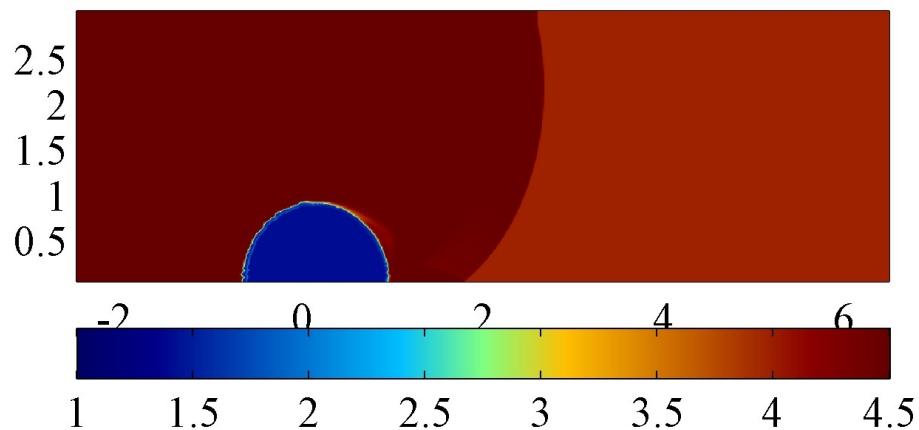
$\lg[n(\text{H}_2)/n](x,y), t=0.25$



Модель 1 – облако 100К

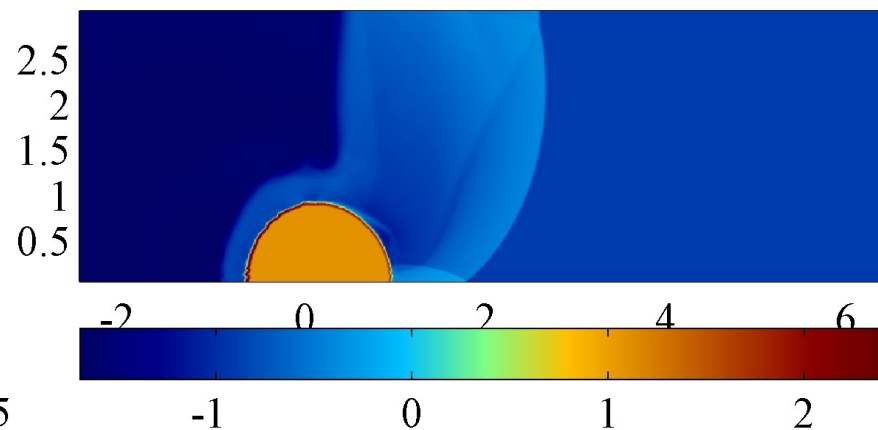
температура

$\lg[T(x,y)], t=0.75$



плотность

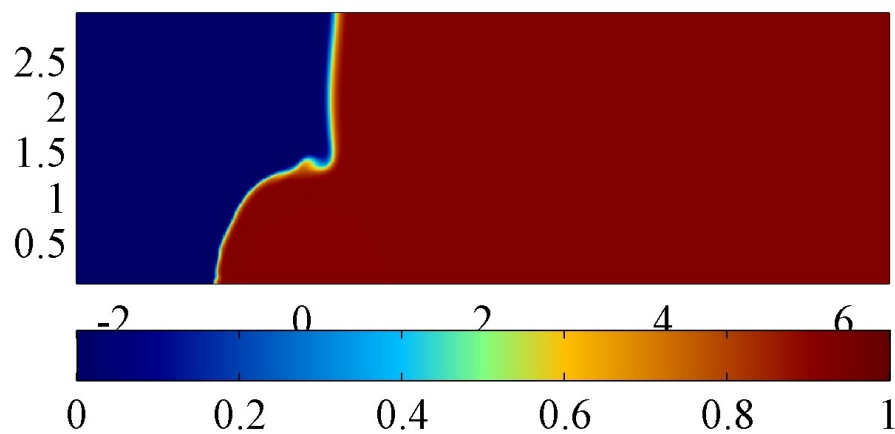
$\lg[\rho](x,y), t=0.75$



Относительные концентрации

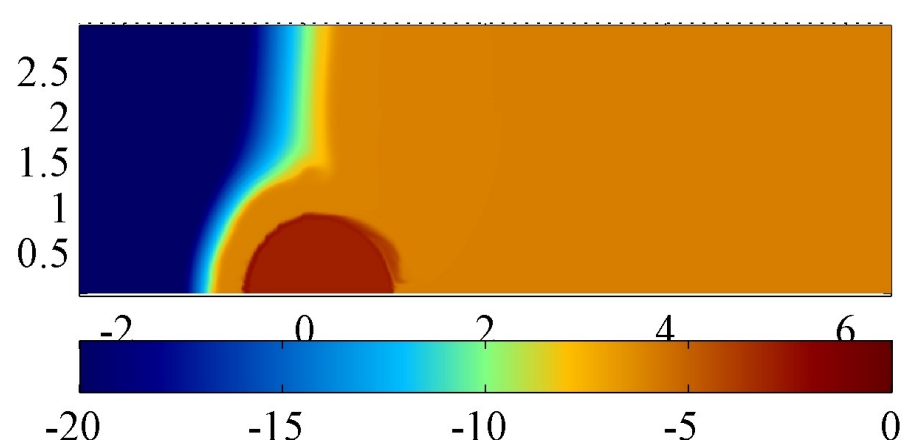
HI

$n(\text{H})/n(x,y), t=0.75$



молекулярный водород

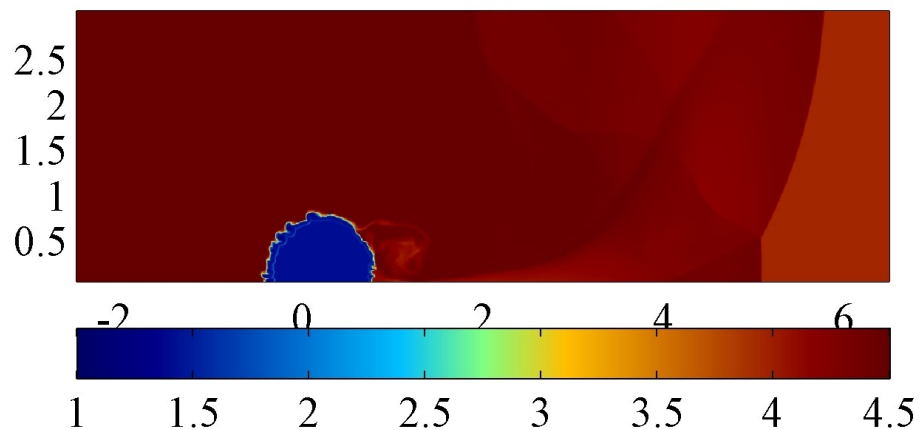
$\lg[n(\text{H}_2)/n](x,y), t=0.75$



Модель 1 – облако 100K

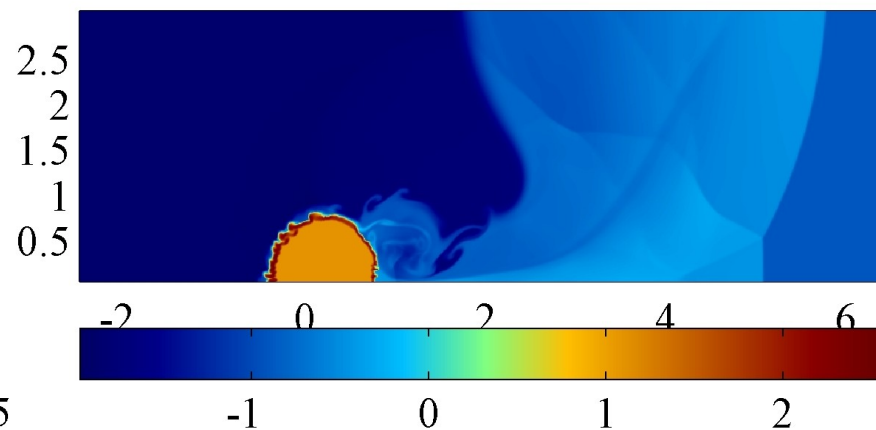
температура

$\lg[T(x,y)], t=1.60$



плотность

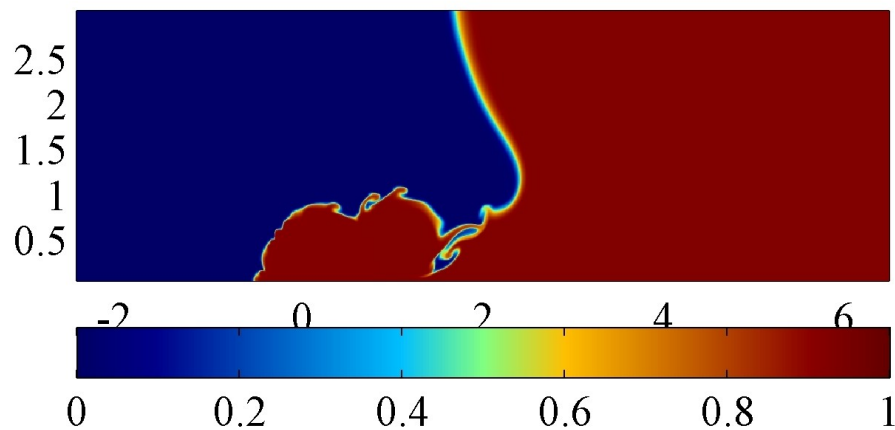
$\lg[\rho](x,y), t=1.60$



Относительные концентрации

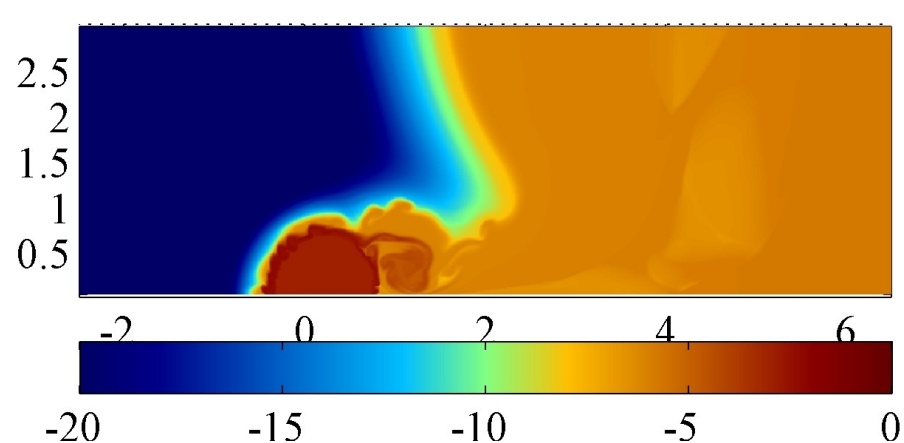
HI

$n(H)/n(x,y), t=1.60$



молекулярный водород

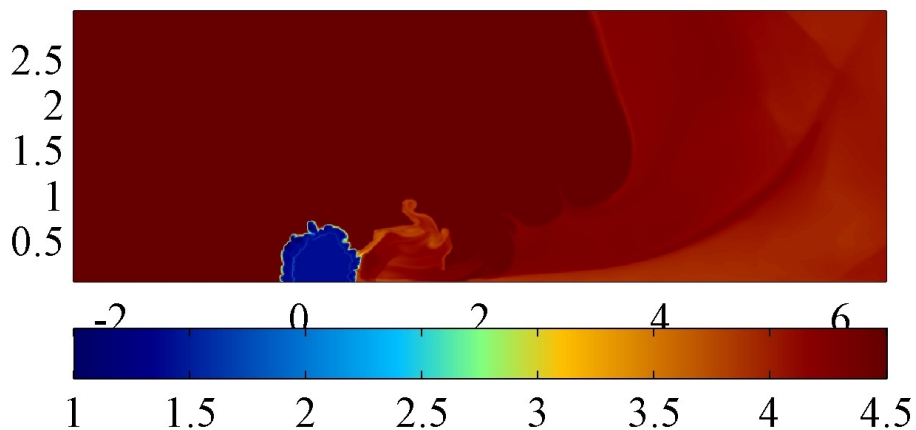
$\lg[n(H_2)/n](x,y), t=1.60$



Модель 1 – облако 100K

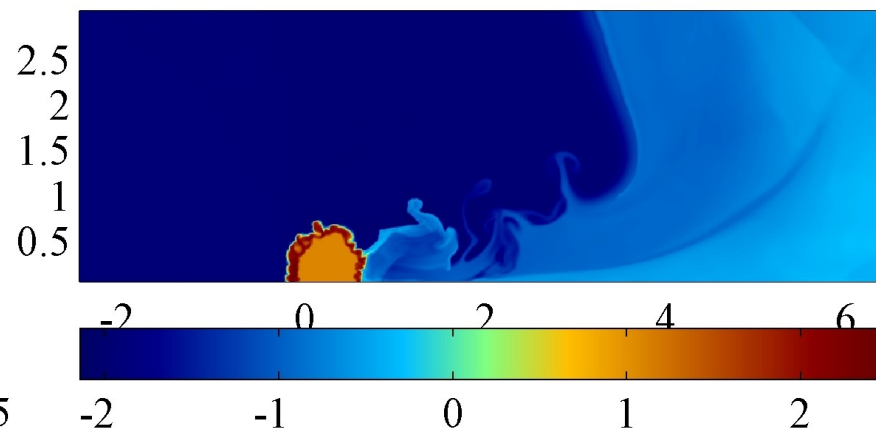
температура

$\lg[T(x,y)], t=2.50$



плотность

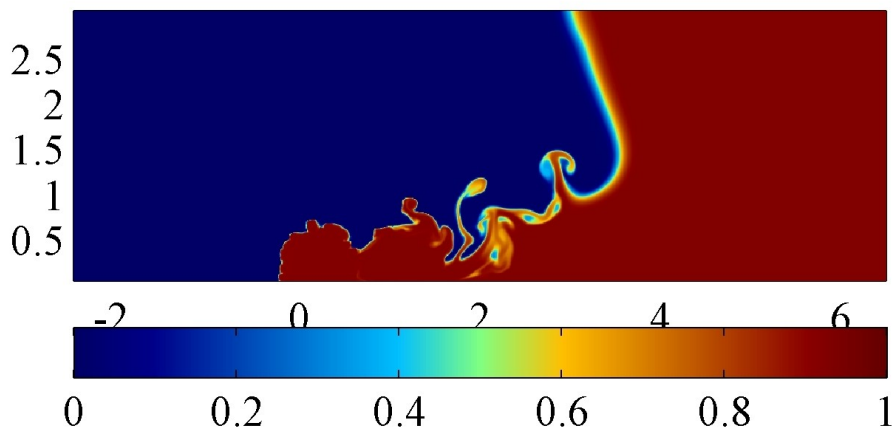
$\lg[\rho](x,y), t=2.50$



Относительные концентрации

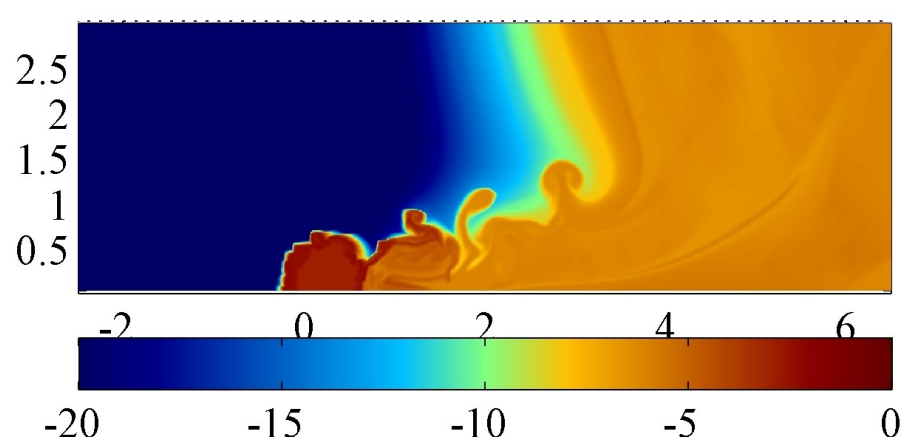
HI

$n(H)/n(x,y), t=2.50$



молекулярный водород

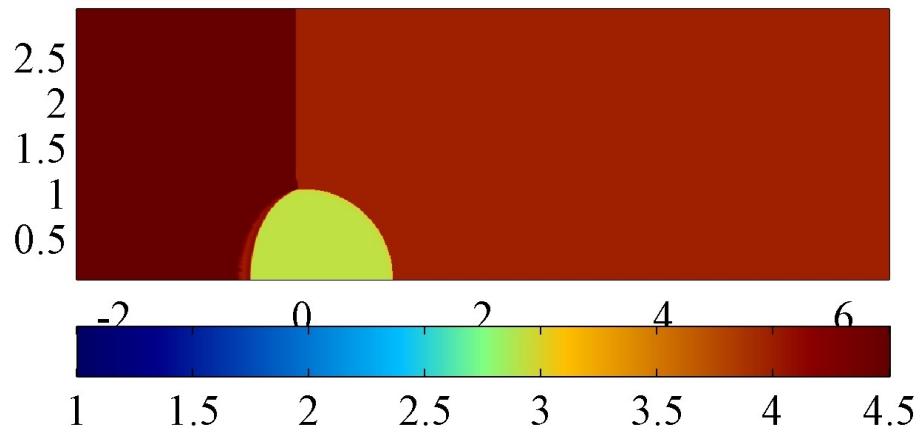
$\lg[n(H_2)/n](x,y), t=2.50$



Модель 2 – облако 1000K

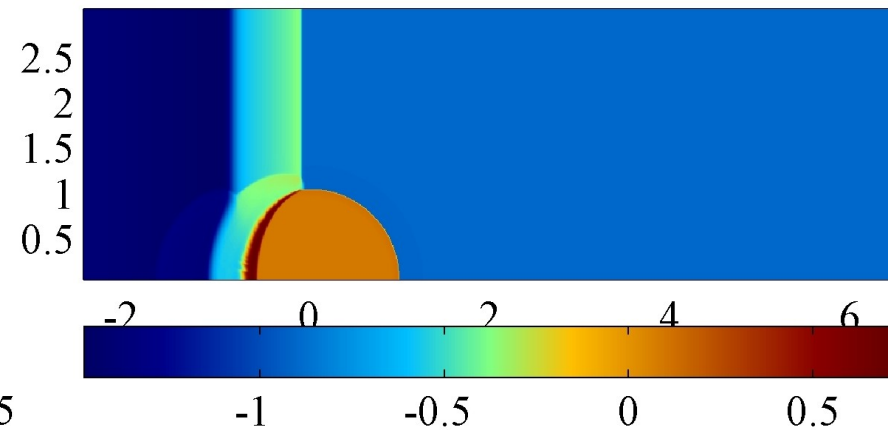
температура

$\lg[T(x,y)], t=0.25$



плотность

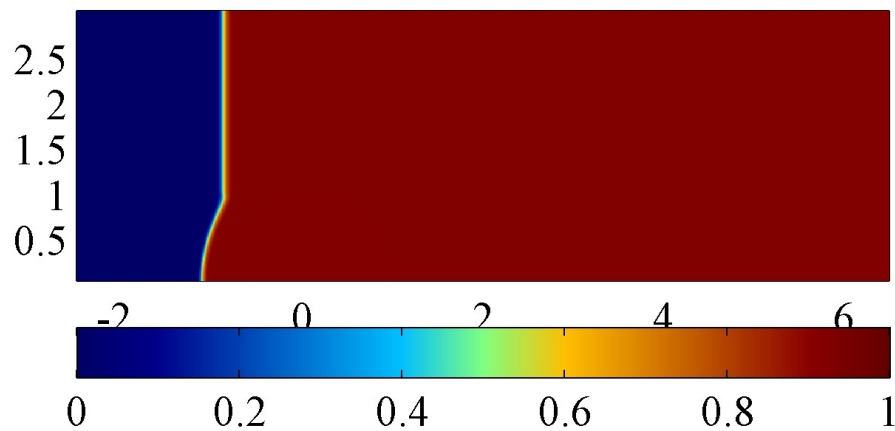
$\lg[\rho](x,y), t=0.25$



Относительные концентрации

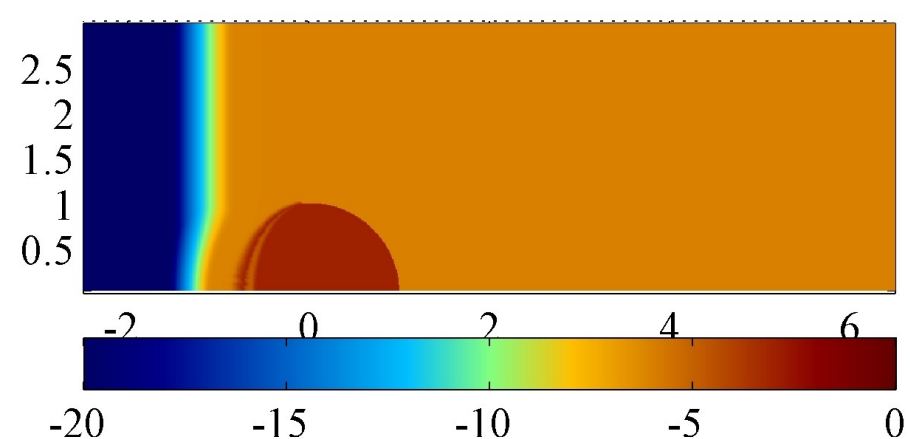
HI

$n(\text{H})/n(x,y), t=0.25$



молекулярный водород

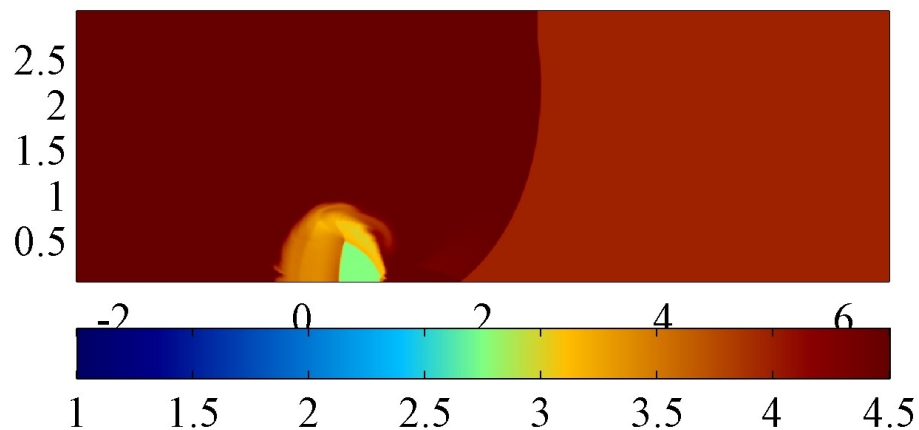
$\lg[n(\text{H}_2)/n](x,y), t=0.25$



Модель 2 – облако 1000K

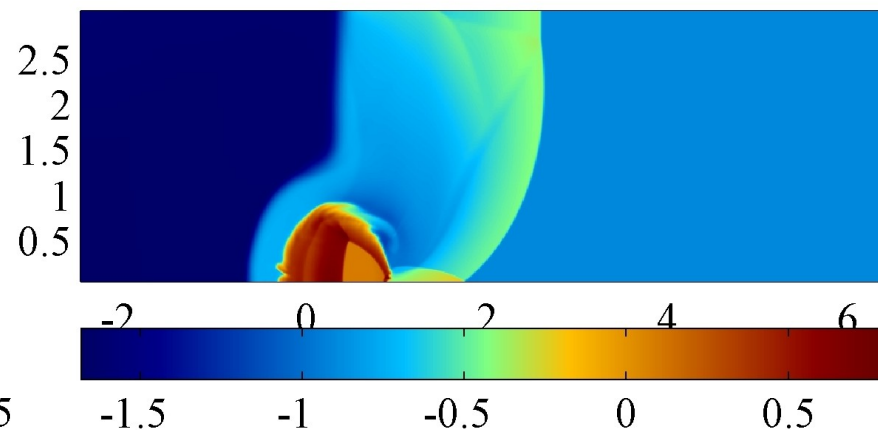
температура

$\lg[T(x,y)], t=0.75$



плотность

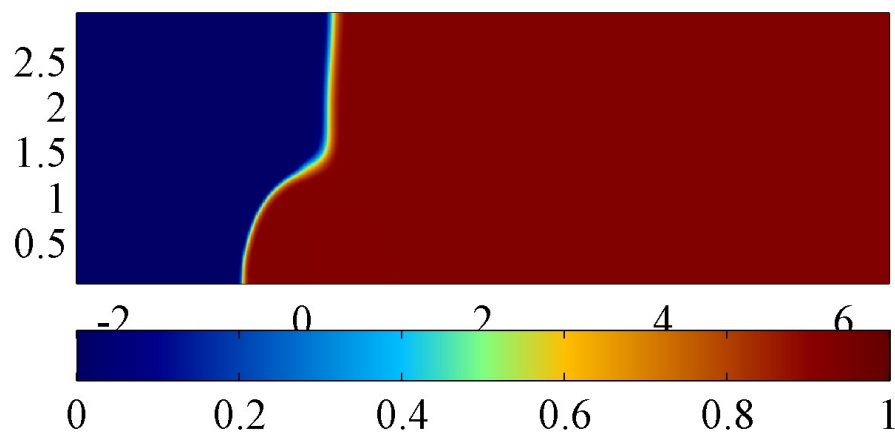
$\lg[\rho](x,y), t=0.75$



Относительные концентрации

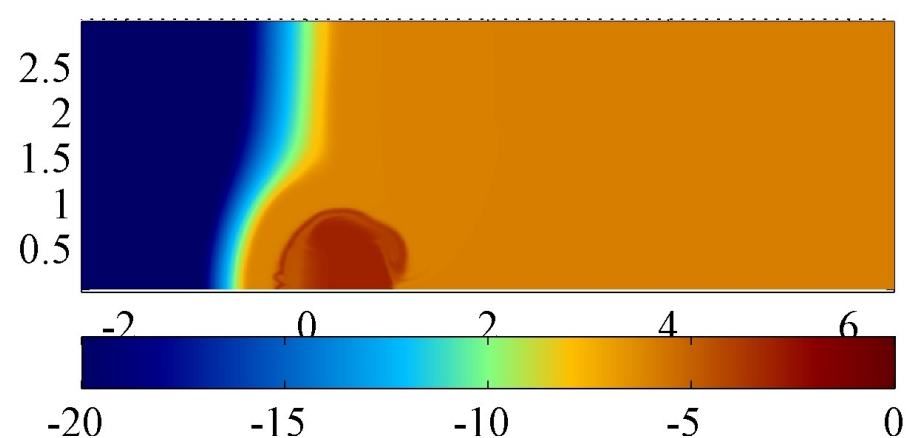
HI

$n(H)/n(x,y), t=0.75$



молекулярный водород

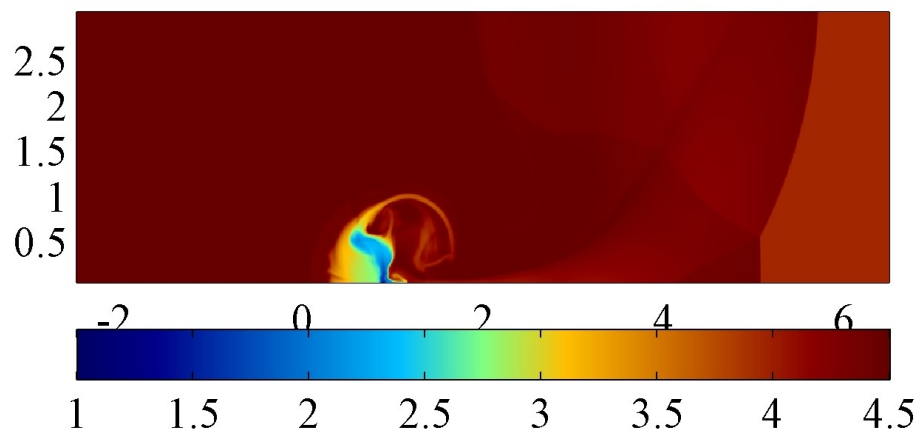
$\lg[n(H_2)/n](x,y), t=0.75$



Модель 2 – облако 1000K

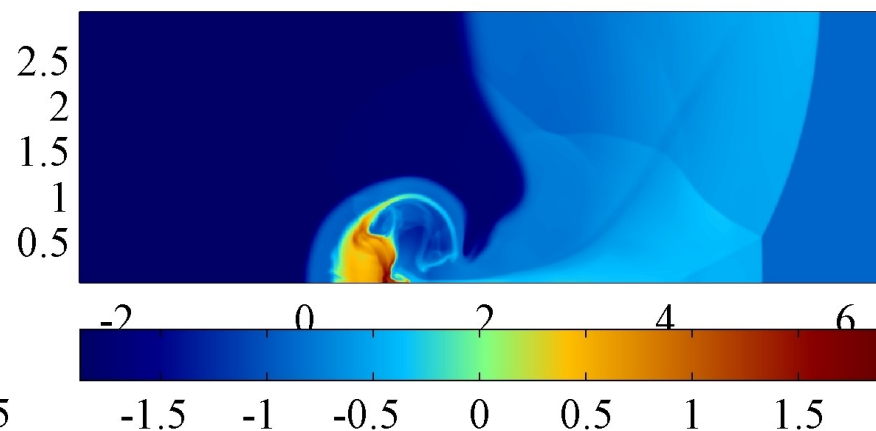
температура

$\lg[T(x,y)], t=1.60$



плотность

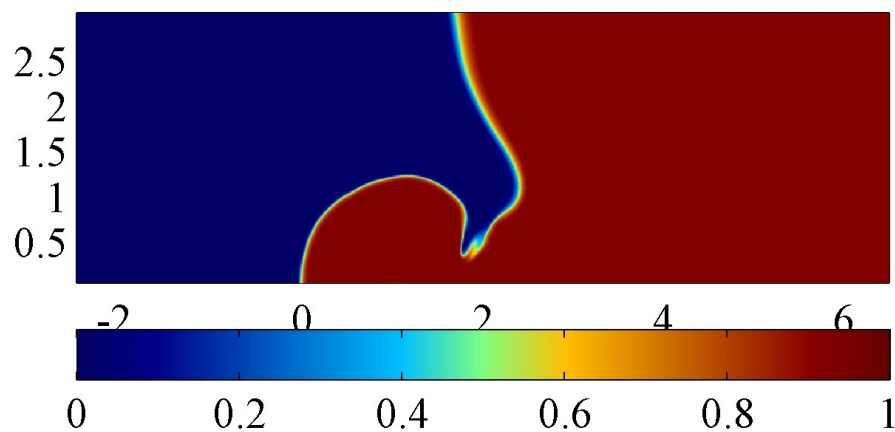
$\lg[\rho](x,y), t=1.60$



Относительные концентрации

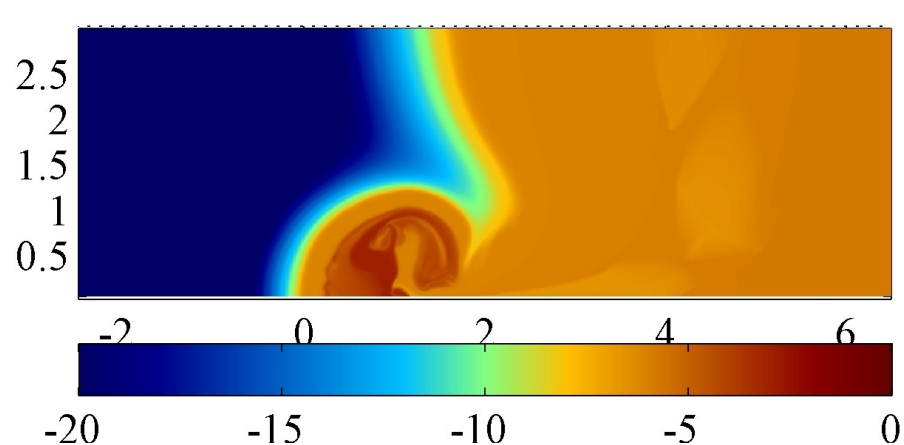
HI

$n(H)/n(x,y), t=1.60$



молекулярный водород

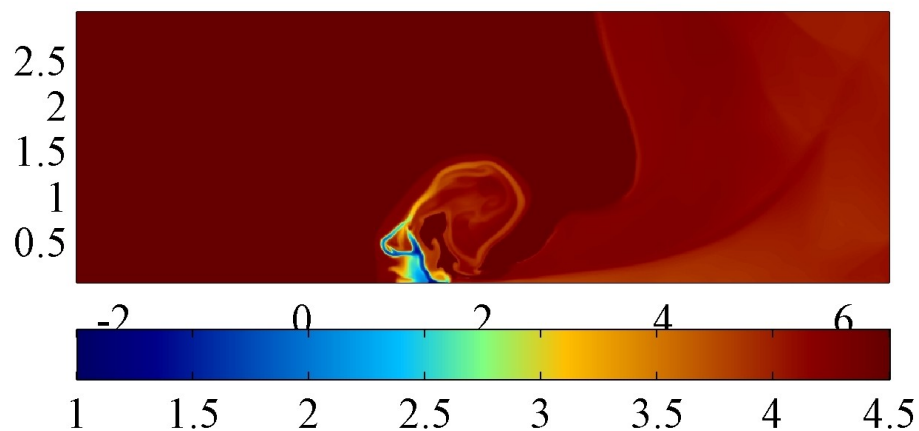
$\lg[n(H_2)/n](x,y), t=1.60$



Модель 2 – облако 1000K

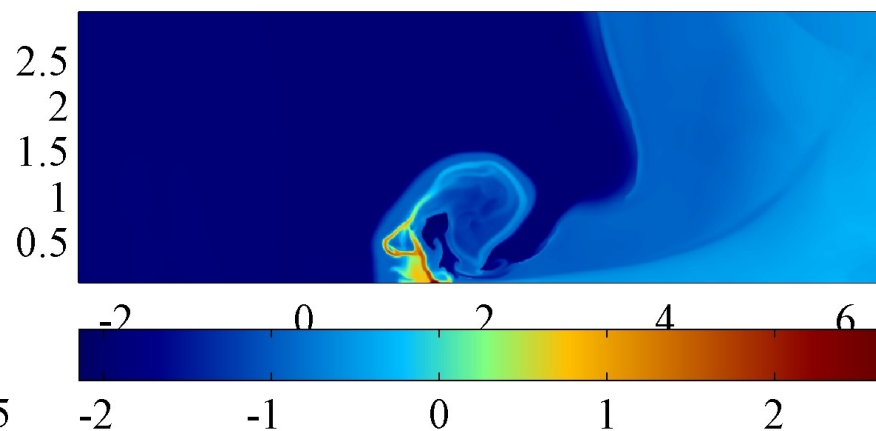
температура

$\lg[T(x,y)], t=2.50$



плотность

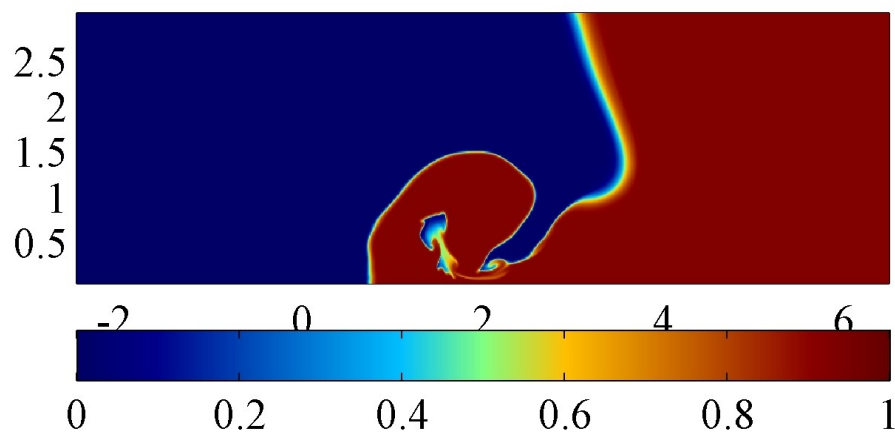
$\lg[\rho](x,y), t=2.50$



Относительные концентрации

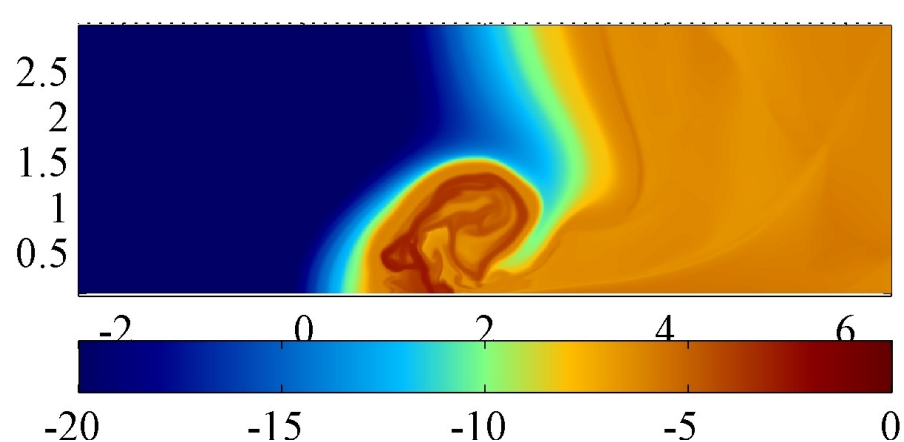
HI

$n(\text{H})/n(x,y), t=2.50$



молекулярный водород

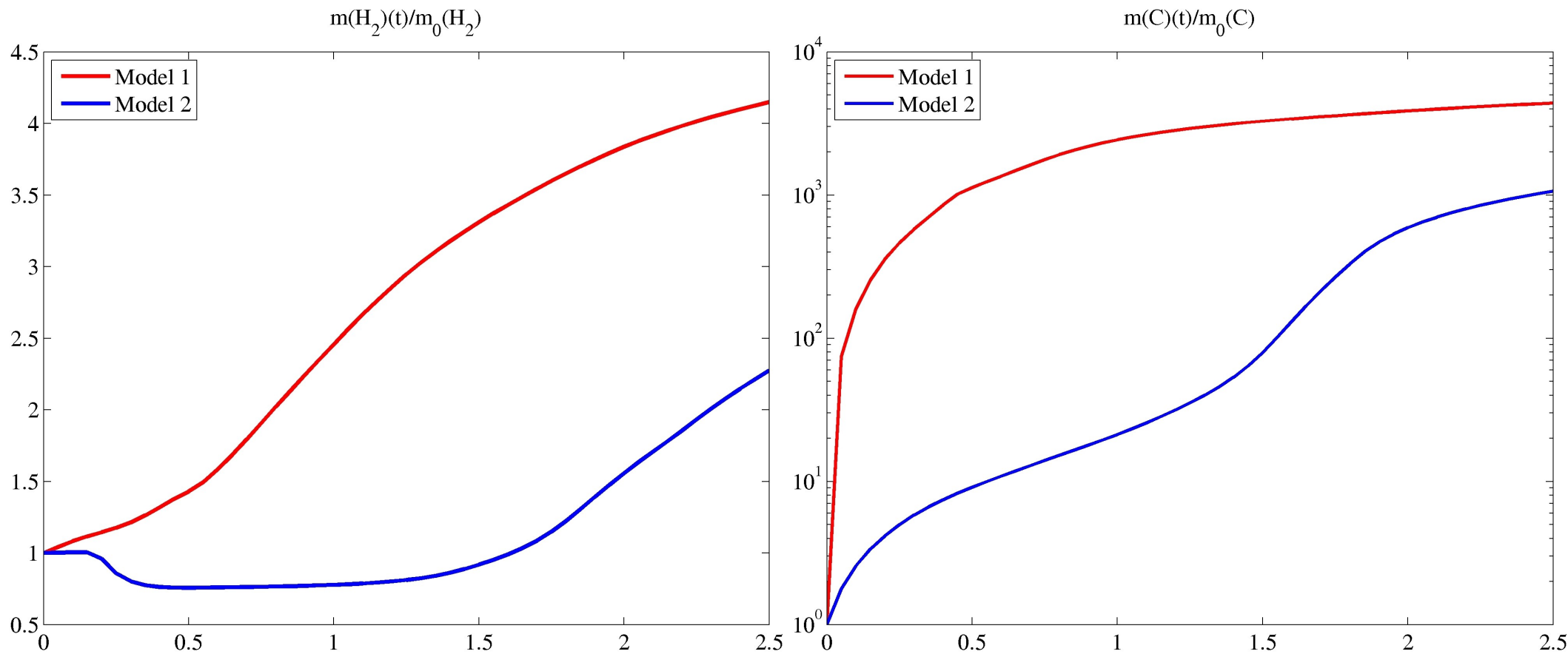
$\lg[n(\text{H}_2)/n](x,y), t=2.50$



Сравнение интегральных характеристик моделей

Эволюция массы молекулярного водорода (слева) и нейтрального углерода (справа)

для модели 1 и модели 2



Выводы

- В результате взаимодействия ударной волны с облаком наблюдаются значительные изменения в химическом составе облака: разрушение молекулярного водорода, ионизация H I и металлов.
- Динамика взаимодействия ударной волны с облаком существенным образом зависит от плотности облака

Спасибо за внимание!

Дополнения

ИСТОЧНИКИ

1. Abel T., Anninos P., Zhang Yu., Norman M.L., 1997, NewA, 2, 181
2. Galli D. & Palla F., 1998, A&A, 335, 403
3. Glover, Jappsen, 2007, ApJ, 666, 1
4. Hollenbach D., & McKee C.F., 1979, ApJs, 41, 555
5. Mac Low M.-M., Shull J.M., 1986, ApJ, 302, 585
6. Palla F., Stahler S.W., & Salpeter E.E., 1983, ApJ, 271, 632
7. Shapiro P.R. & Kang H., 1987, ApJ, 318, 32

Необходимость учета химических реакций в астрофизике

- Химические реакции играют важную роль в наиболее сложных и до сих пор плохо изученных процессах во вселенной, таких как **коллапс газово-пылевых облаков, образование протопланетных дисков, взаимодействие межзвездных облаков с ударной волной** и других.
- Судить о составе окружающей нас вселенной мы можем по наблюдениям лишь небольшого количества химических элементов. Потому, для адекватной трактовки **наблюдательных данных**, необходимо знать достаточно точный химический состав среды, а значит мы должны уметь предсказывать не только динамическую, но и **химическую эволюцию объектов** во вселенной.

Уравнения газовой динамики

Система уравнений газовой динамики с учетом тепловых процессов и теплопроводности записывается в виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ([E + p]\mathbf{u}) = \nabla [k(T)\nabla T] - L(p, n). \quad (3)$$

Здесь ρ , p , $\mathbf{u} = \{u, v, w\}$ – плотность, давление и вектор скорости газа соответственно, $E = \rho \left(e + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right)$ – объемная энергия, $k(T)$ – коэффициент теплопроводности, $L(p, n) = \Lambda(T)n^2 - \Gamma(T)n$ – функция тепловых потерь, $\Lambda(T)$ – функция объемного охлаждения, $\Gamma(T)$ – функция объемного нагрева. Для идеального газа удельная энергия определяется выражением: $e = \frac{p}{\rho(\gamma-1)}$. Связь между давлением и температурой задается уравнением состояния: $p = nk_B T$, где k_B – постоянная Больцмана.

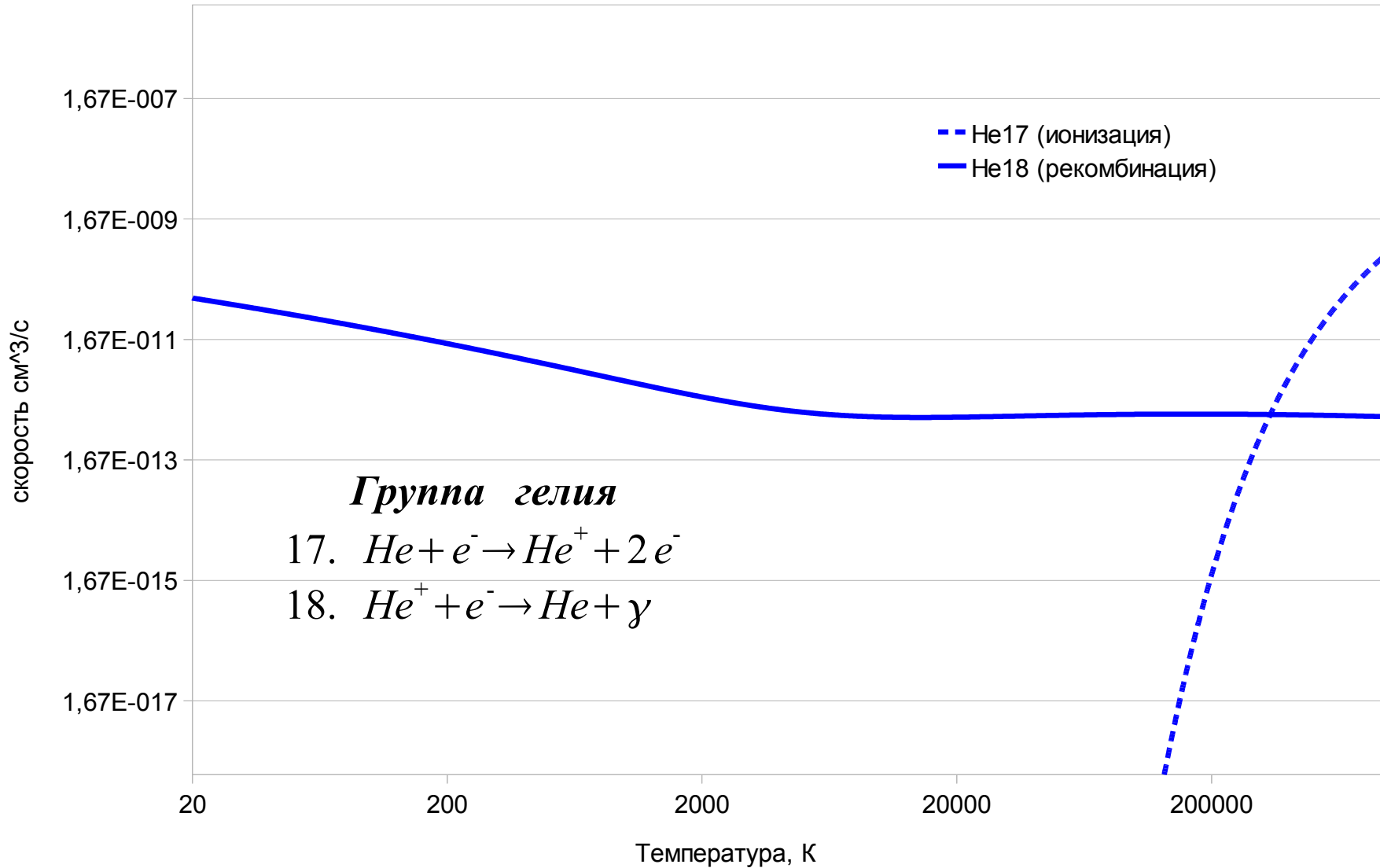
Анализ моделей

В модели 1 увеличение плотности во внешних слоях облака способствует формированию молекул водорода и рекомбинации углерода. Хорошо заметна корреляция между высокой концентрацией молекул водорода и C I. В модели 2 подобная картина наблюдается только для холодного газа ($T < 300\text{K}$). В филаментных структурах теплого газа относительная концентрация молекул водорода достигает 0.001, а углерод остается ионизованным.

Скорости реакций

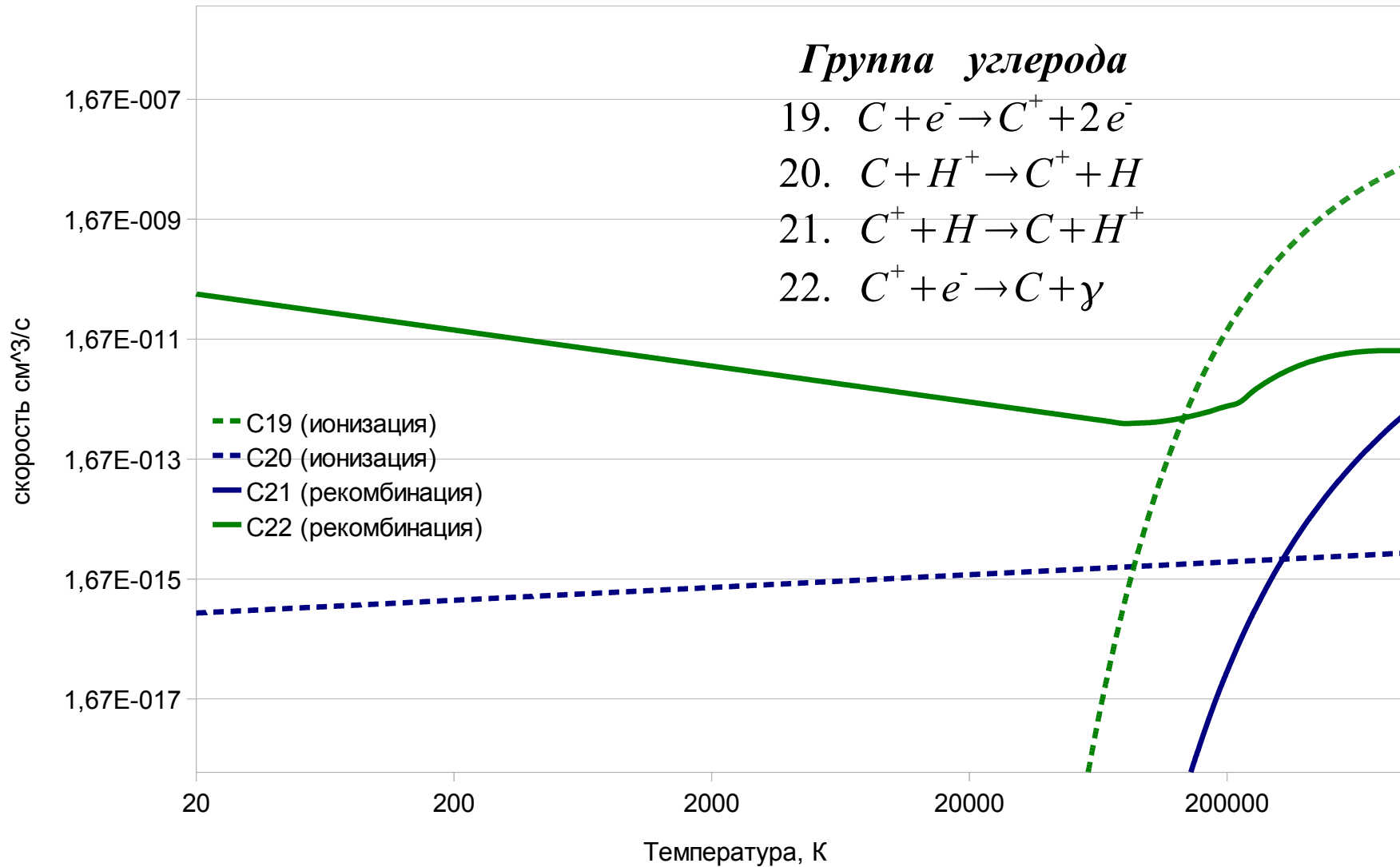
Гелиевая группа

Константы скоростей реакций



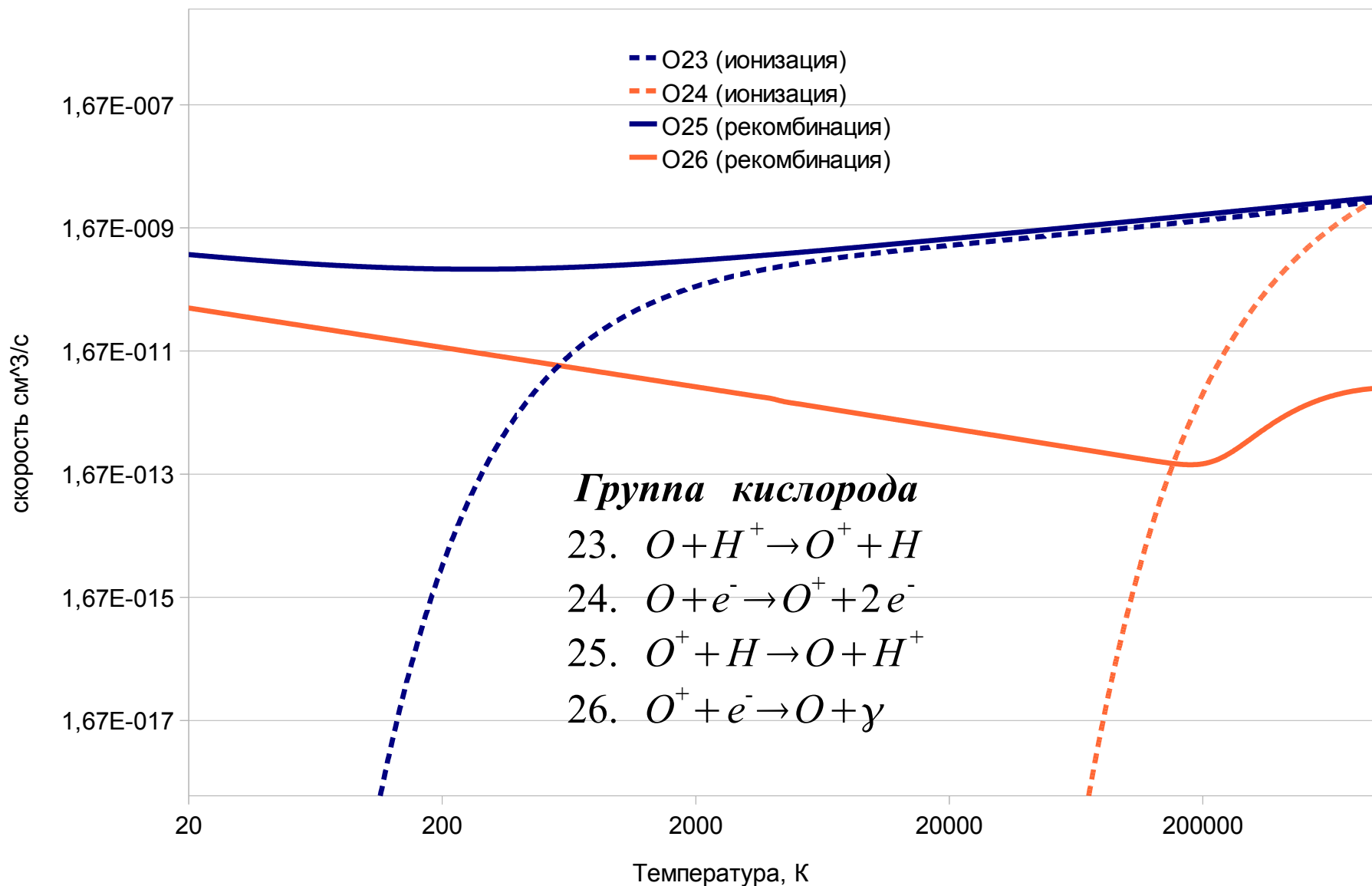
Углеродная группа

Константы скоростей реакций



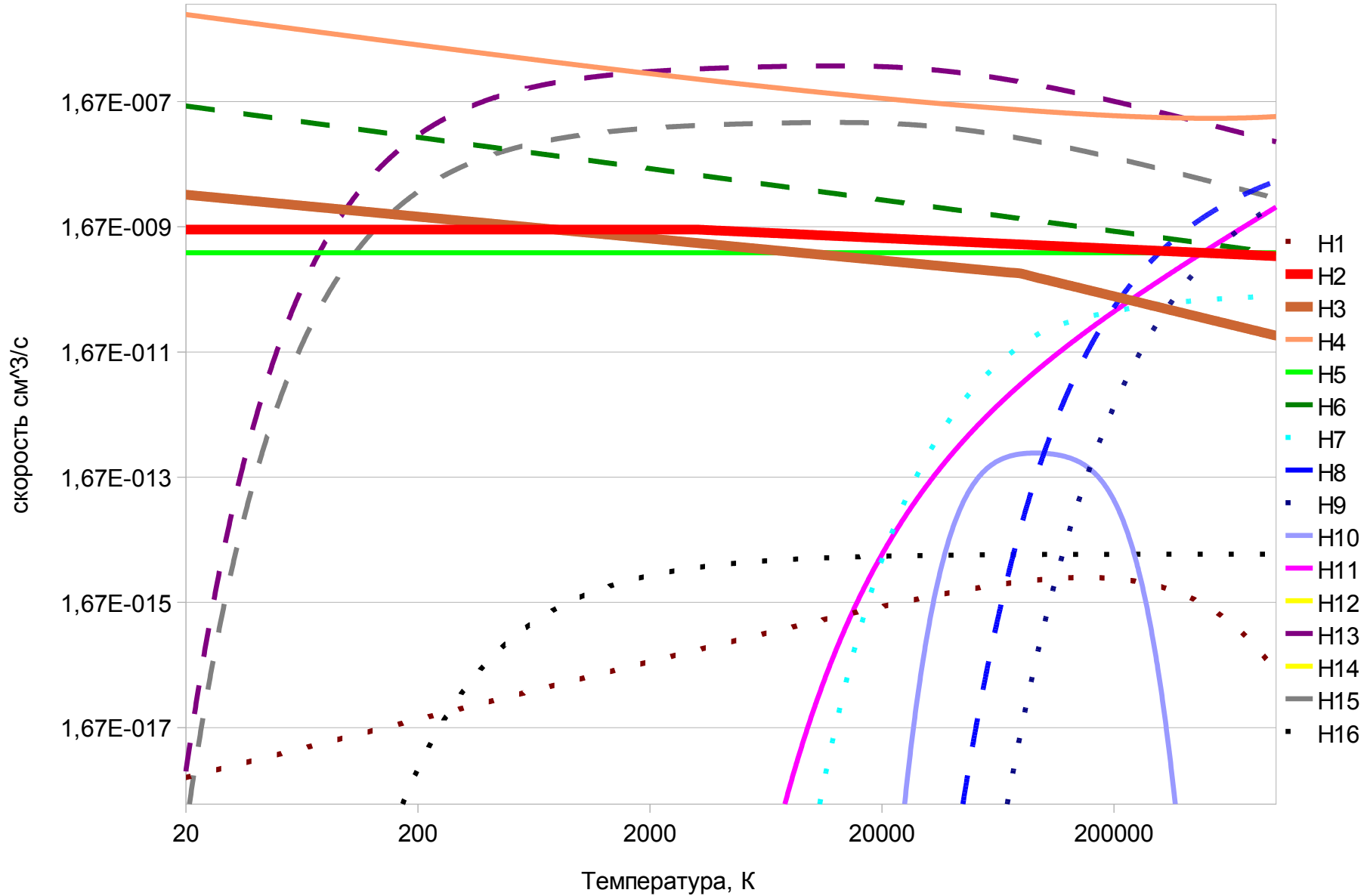
Группа кислорода

Константы скоростей реакций



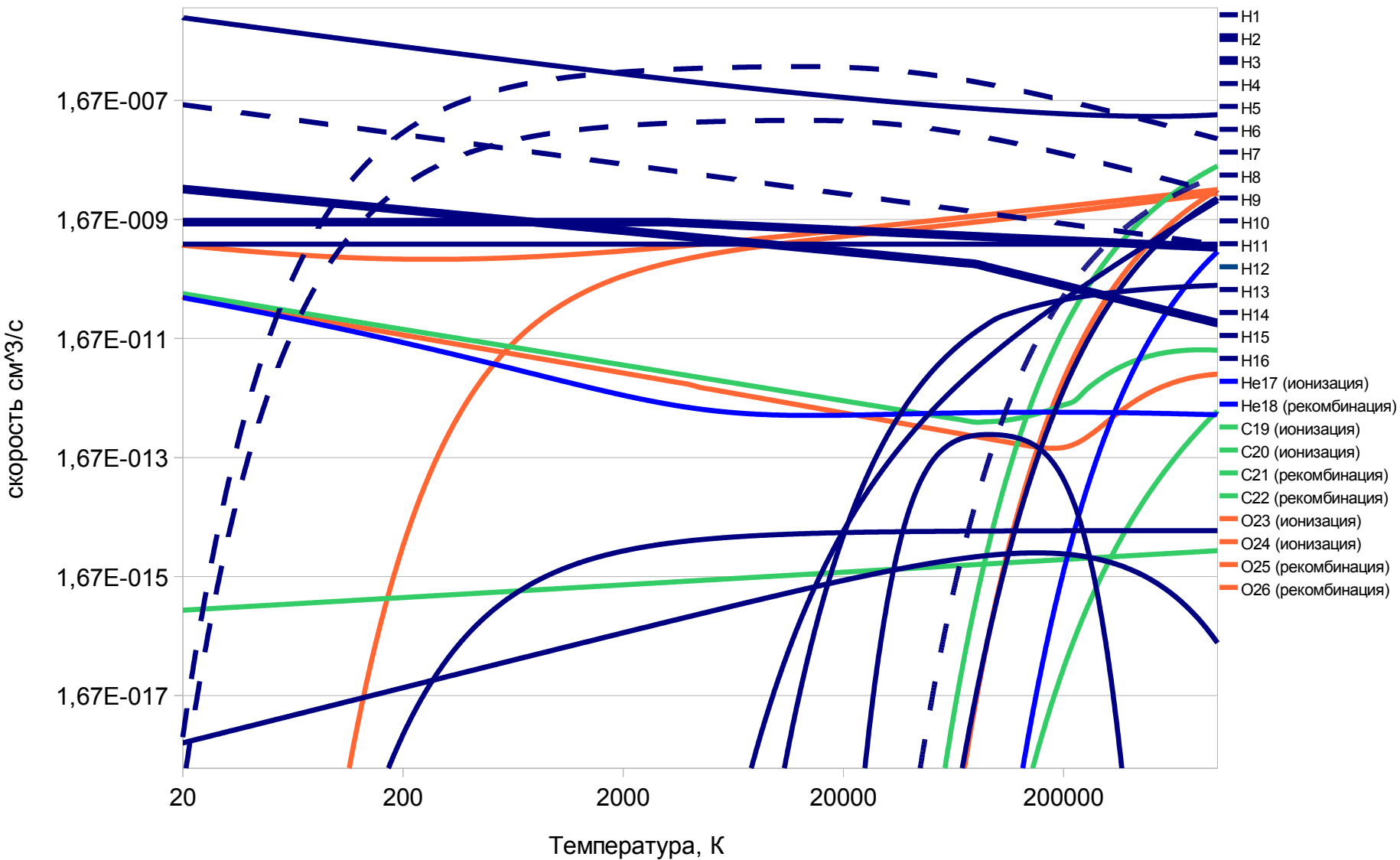
Водородная группа

Константы скоростей реакций



Скорости реакций. Общий график

Константы скоростей реакций



Скорости реакций.

Сортировка по температурам

*Реакции, идущие при
любой температуре*

Водородная группа

2. $H^- + H \rightarrow H_2 + e^-$
3. $H^- + H^+ \rightarrow H_2 + e^-$
4. $H^- + H^+ \rightarrow 2H$
5. $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$
6. $H_2^+ + e^- \rightarrow 2H$
13. $H_2 + H \rightarrow H + H + H$
15. $H_2 + H_2 \rightarrow H + H + H_2$
18. $He^+ + e^- \rightarrow He + \gamma$

Группа углерода

22. $C^+ + e^- \rightarrow C + \gamma$

Группа кислорода

23. $O + H^+ \rightarrow O^+ + H$
25. $O^+ + H \rightarrow O + H^+$
26. $O^+ + e^- \rightarrow O + \gamma$

из них медленные

1. $H + e^- \rightarrow H^- + \gamma$
16. $H + H \rightarrow H^+ e^- + H$
20. $C + H^+ \rightarrow C^+ + H$

*Реакции, значительные только
при высоких температурах*

Водородная группа

7. $H_2 + H^+ \rightarrow H_2^+ + H$
8. $H_2 + e^- \rightarrow 2H + e^-$
9. $H + e^- \rightarrow H^+ + 2e^-$
10. $H^+ + e^- \rightarrow H + \gamma$
11. $H^- + H \rightarrow 2H + e^-$

Группа гелия

17. $He + e^- \rightarrow He^+ + 2e^-$

Группа углерода

19. $C + e^- \rightarrow C^+ + 2e^-$
21. $C^+ + H \rightarrow C + H^+$

Группа кислорода

24. $O + e^- \rightarrow O^+ + 2e^-$

Незначительные

при любых температурах

12. $H + H + H \rightarrow H_2 + H$
14. $H + H + H_2 \rightarrow H_2 + H_2$