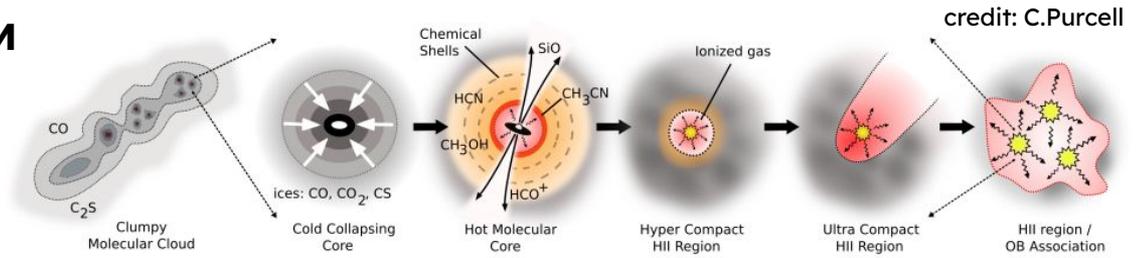


Химические особенности горячего ядра на ранней стадии эволюции

А. А. Фарафонтова¹, М.С. Кирсанова¹

¹Институт Астрономии РАН

Начальные стадии эволюции НМYSO и молекулы- индикаторы

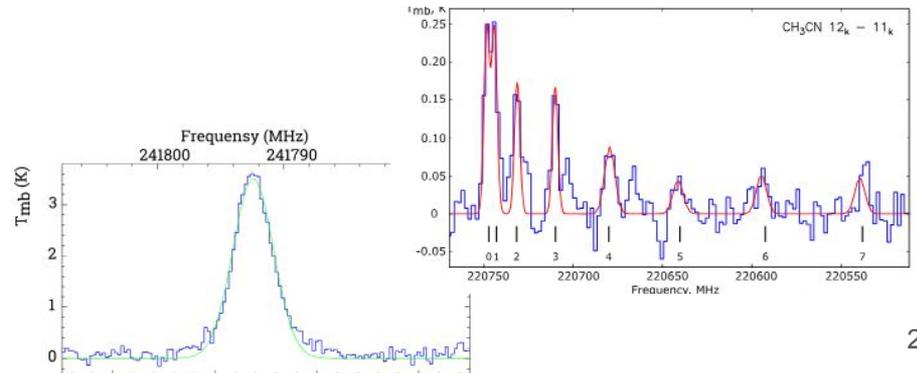


Горячее ядро (>100 K):

- Сублимация льдов → выброс COM в газ (Millar, MacDonald & Gibb 1997)
- Высвобождение COM в газ посредством ударных волн и истечений (Palau+2017)
- Газофазные реакции

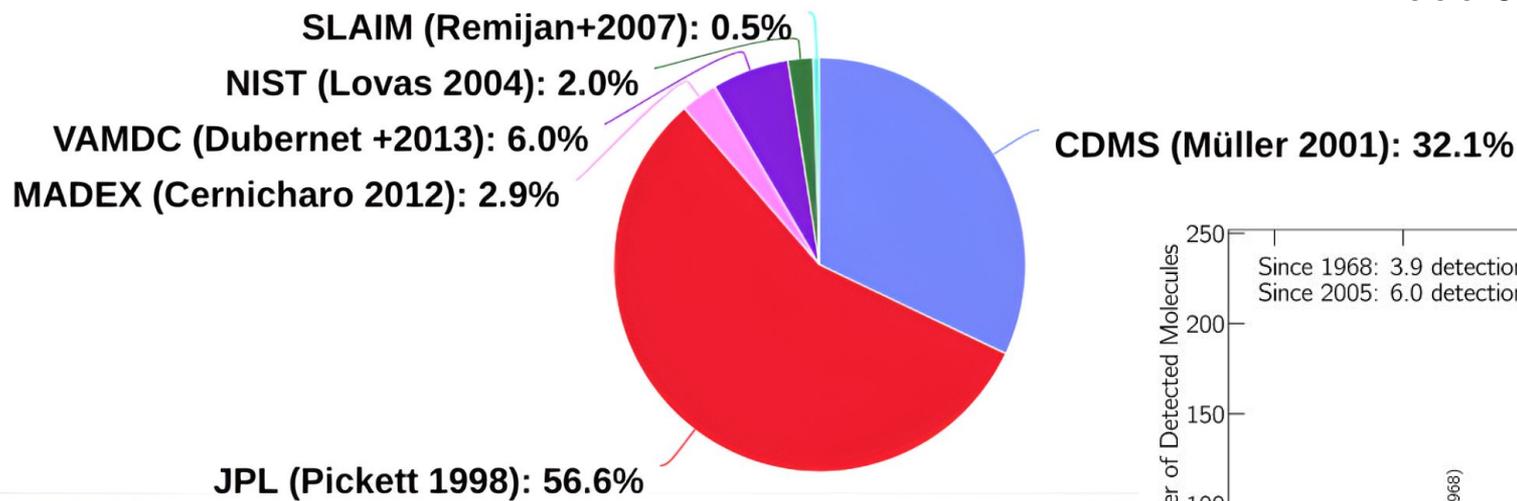
CH₃OH, **CH₃CN**, **CH₃OCH₃** (Bisschop S+2007),
HCOOH (Garrod+2006), **CH₃CHO**, **H₂CS**, **OCs**
(Tychoniec et. al., 2021), **CH₃CCH** и др.

Истечение: **SiO** (van Dishoeck+1998), **SO**,
SO₂ (Charnley 2009)

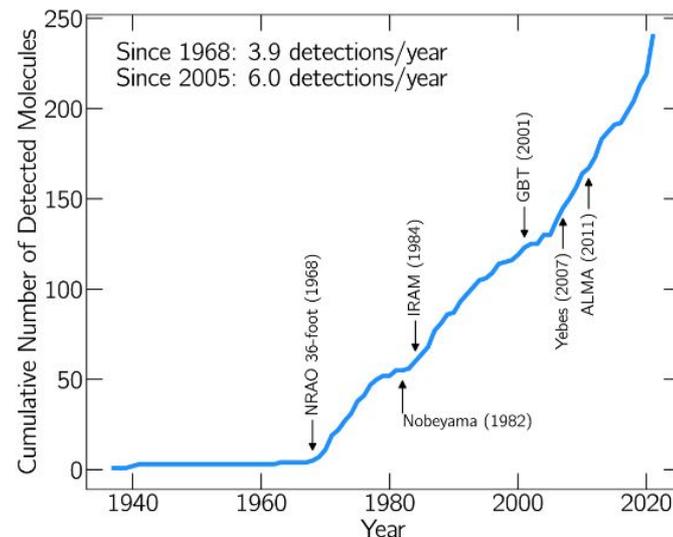


Отождествление спектральных линий

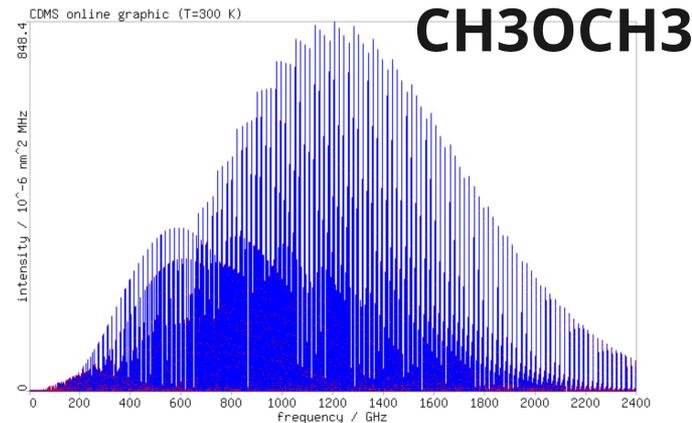
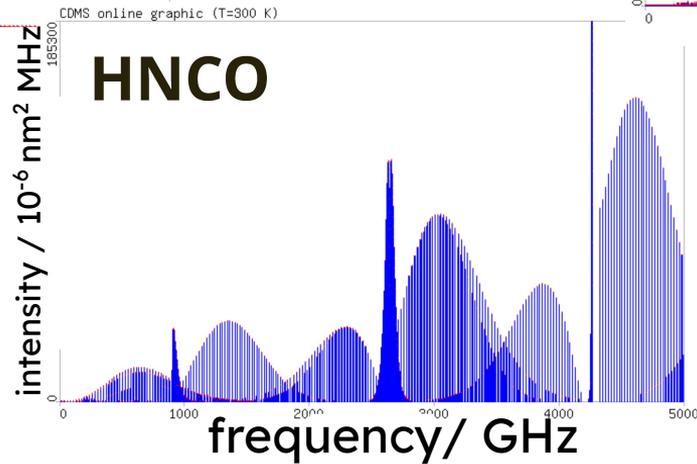
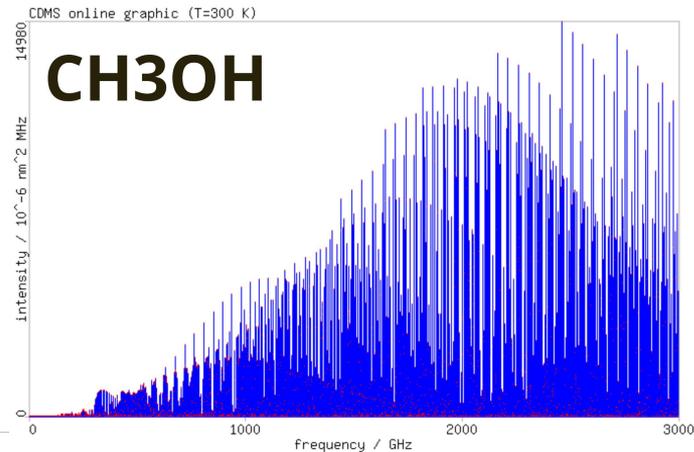
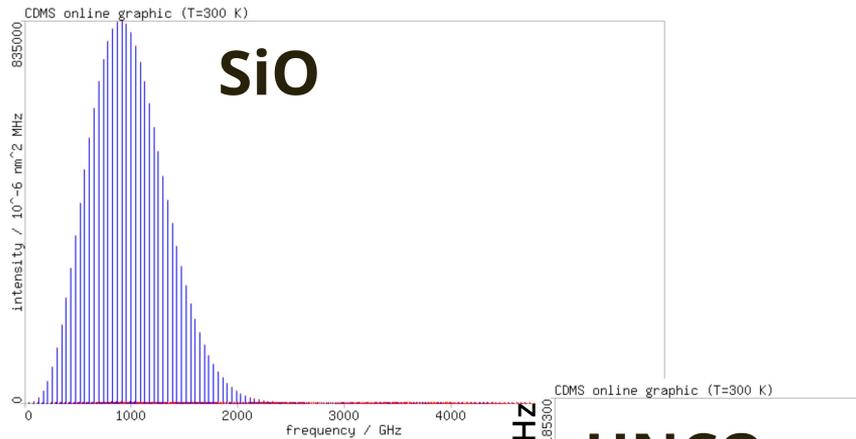
Молекулы в МЗС:
>300 отождествлено



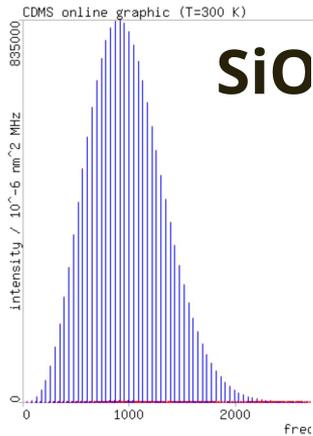
Отождествление линий путем сравнения
наблюдаемых частот с частотами покоя
молекул из баз данных



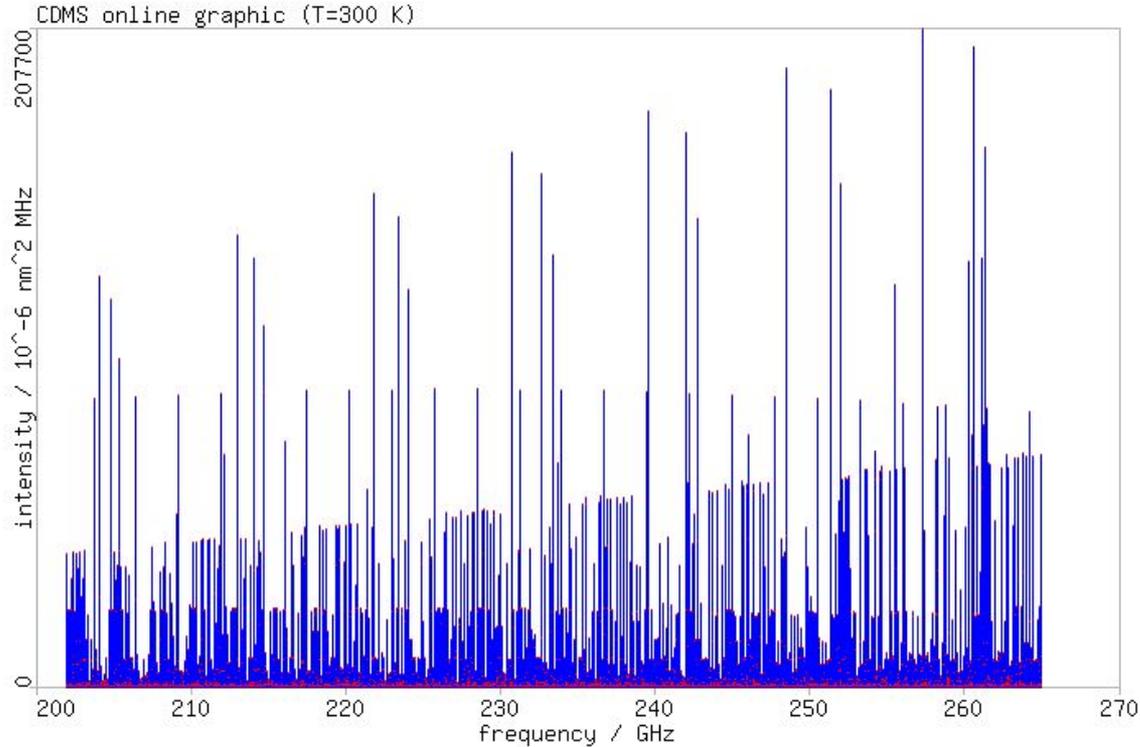
McGuire 2021



— Каждая вертикальная синяя линия
представляет собой известную спектральную
линию из базы данных CDMS.

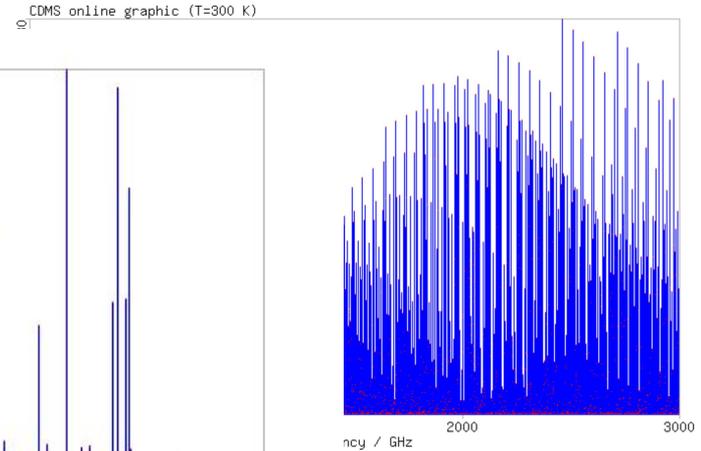


SiO

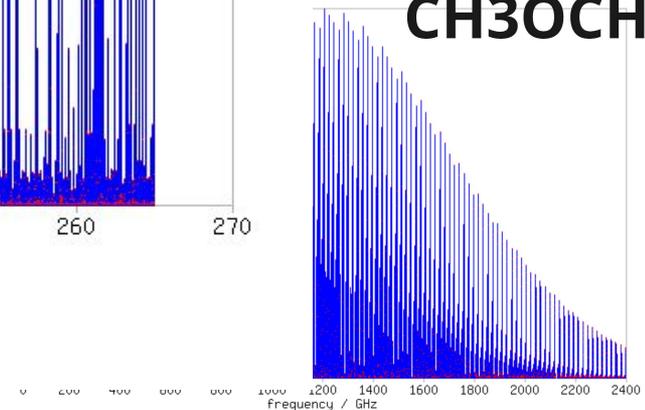


total number of lines found = 232395
total number of species found = 396

— Каждая вертикальная синяя линия представляет собой известную спектральную линию из базы данных CDMS.



CH3OCH3



Цели и задачи работы

Актуальность: автоматизация отождествления молекул повышает точность и скорость обработки спектральных данных.

Цели:

- автоматизировать отождествление линий излучения молекул в широкополосных спектрах (>1 ГГц),
- проанализировать хим. состав RCW 120 YSO S2.

Задачи:

- Используя известные базы спектроскопических данных, разработать алгоритм для отождествления молекул.
- Протестировать алгоритм на наблюдательных спектрах области RCW 120 YSO S2.
- Определить физические параметры в приближении ЛТР для выбранных молекул

Массивное горячее ядро RCW 120 YSO S2

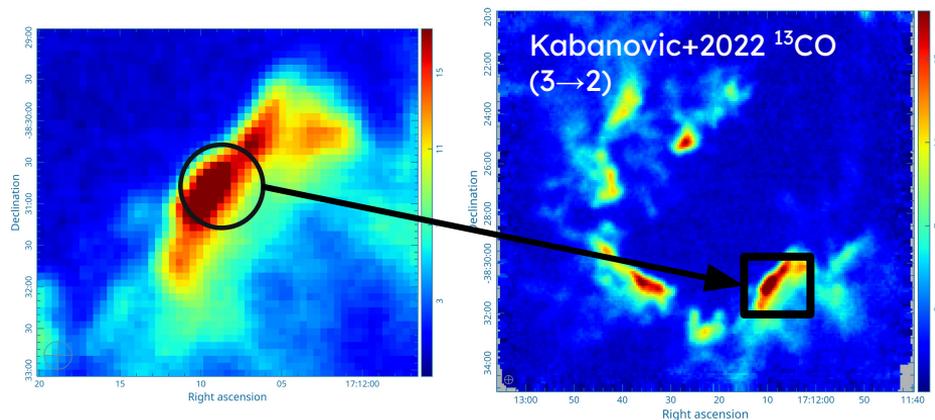
($\alpha_{2000} = 17^{\text{h}}12^{\text{m}}08.70^{\text{s}}$, $\delta = -38^{\circ}30'47.4''$)

$d = 1.34$ кпк (Russeil 2003)

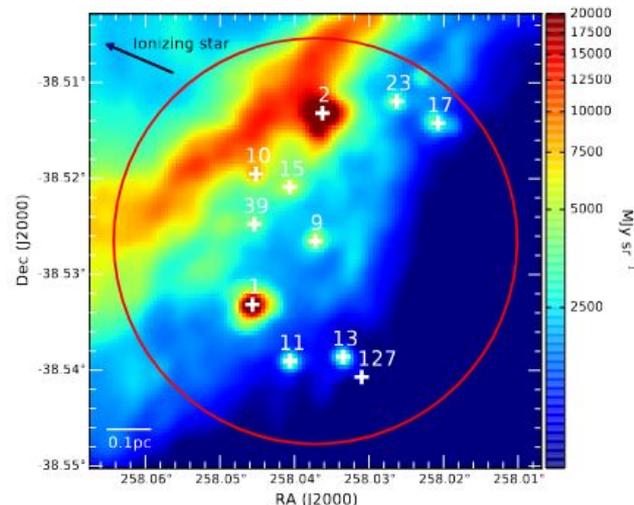
$M_{\text{env}} = 174 M_{\odot}$ (Figueira+2017)

$M_{\text{frag}} = 27.4 \pm 0.6 M_{\odot}$ (Figueira+2018)

YSO Class 0 (Zavagno+2010, Deharveng+2009)



- SHeFI APEX-1 — CH_3OH : $T_{\text{gas}} = 30^{+40}_{-20}$ K,
 $n_{\text{H}_2} = 1.0^{+3.1}_{-0.3} \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$, $f_{\text{CH}_3\text{OH}} = 3.2^{+16}_{-1} \times 10^{-9}$,
 CH_3CN : $T_{\text{ex}} = 61$ K, $N_{\text{CH}_3\text{CN}} = 8.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$
 (Kirsanova+2021)
- nFLASH230 APEX — CH_3OH : $T_{\text{gas}} = 40(30 - 50)$ K, $N_{\text{CH}_3\text{OH}} = 5.0(4.0 - 6.3) \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, CH_3CN :
 $T_{\text{ex}} = 58 \pm 4$ K, $N_{\text{CH}_3\text{CN}} = 6.5 \pm 0.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$,
 CH_3CCH : $T_{\text{ex}} = 41 \pm 1$ K, $N_{\text{CH}_3\text{CCH}} = 23 \pm 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$
 (Plakitina+2024)

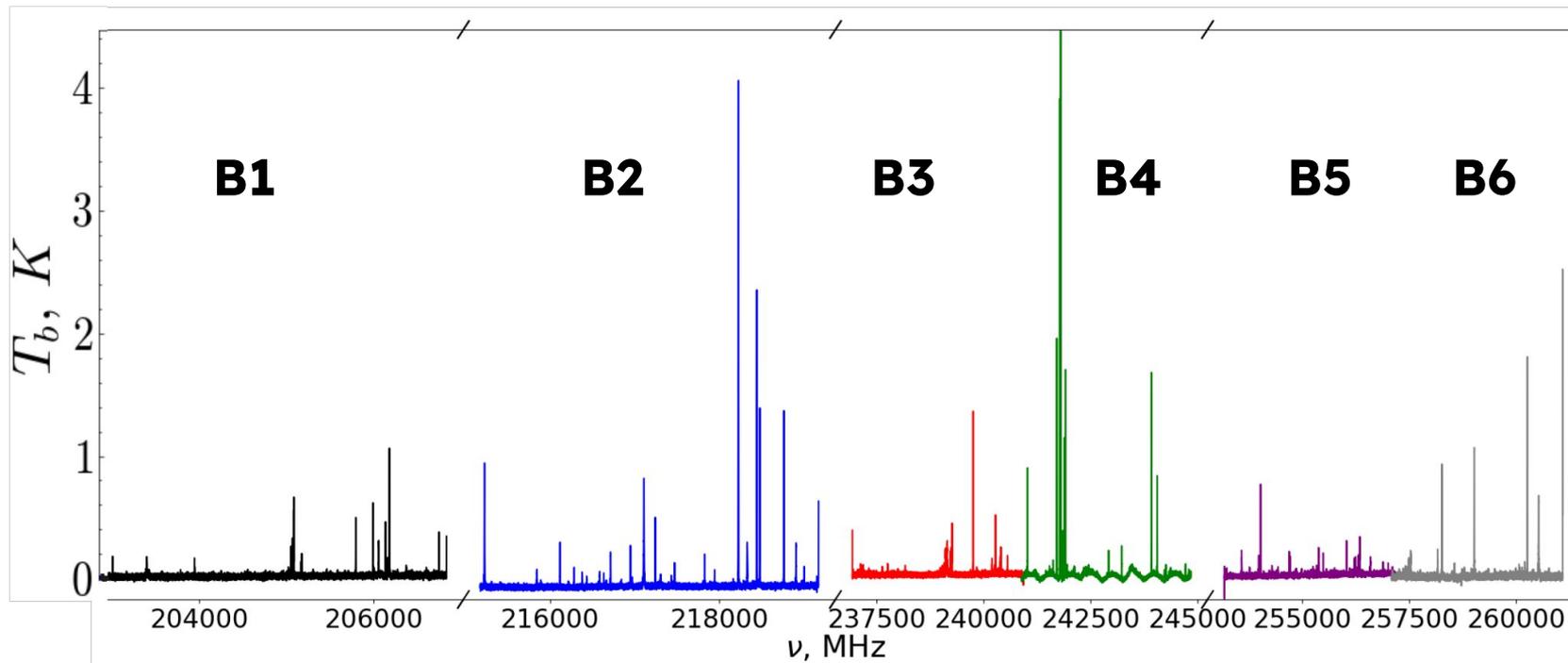


Herschel 70 μm image of Condensation 1 (Figueira+2018)

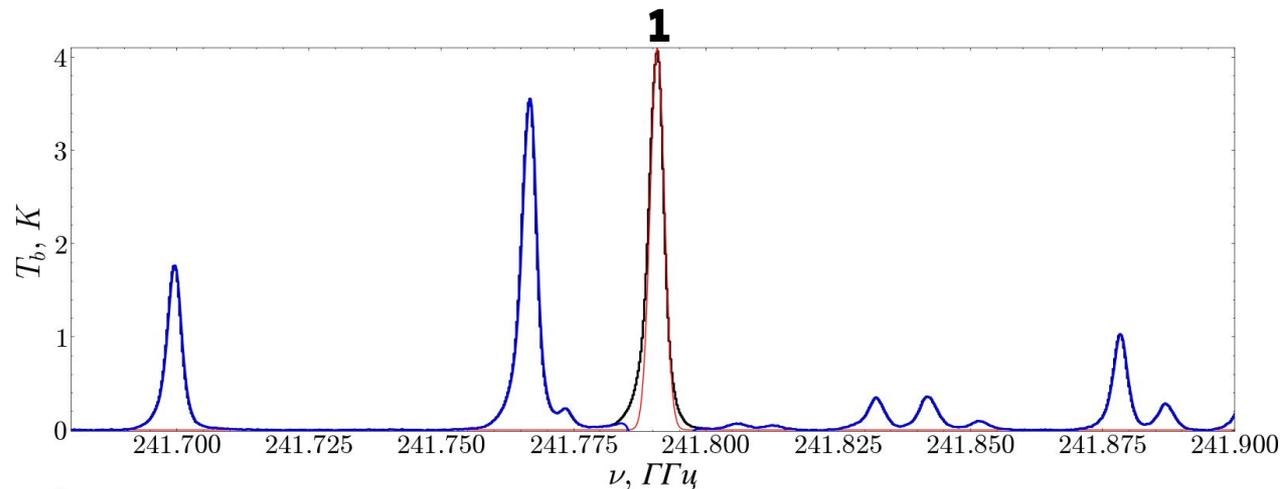
Наблюдательные данные

Время накопления сигнала: $\sim 3.5^h$,
Спектральное разрешение: ~ 0.3 км/с, Уровень
шума (σ): ~ 4 мК

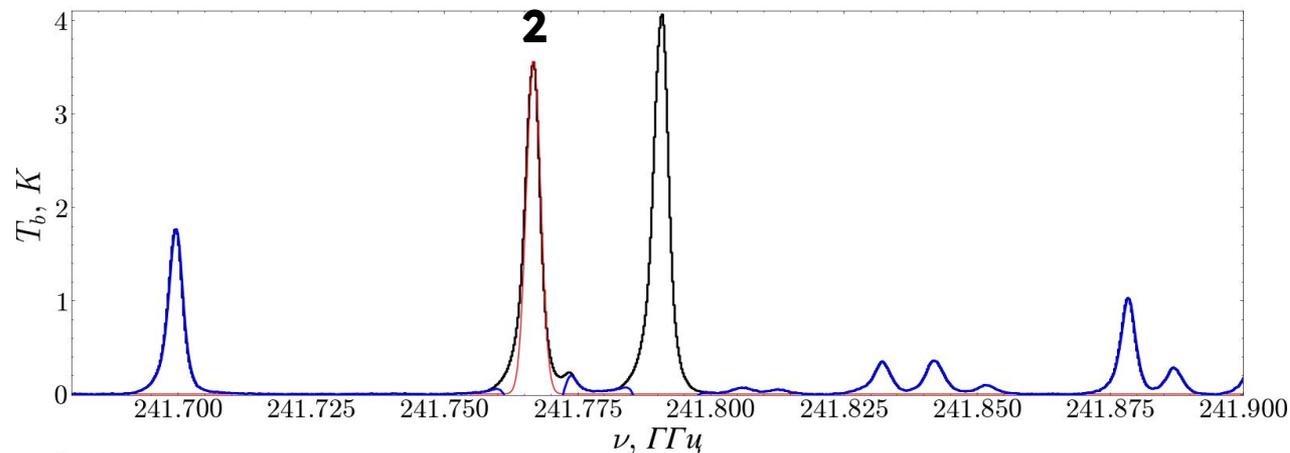
nFLASH230 APEX: 202.8-206.8, 215-219,
236.9-240.9, 241-245, 253-257, 257-261 ГГц.



Алгоритм отождествления



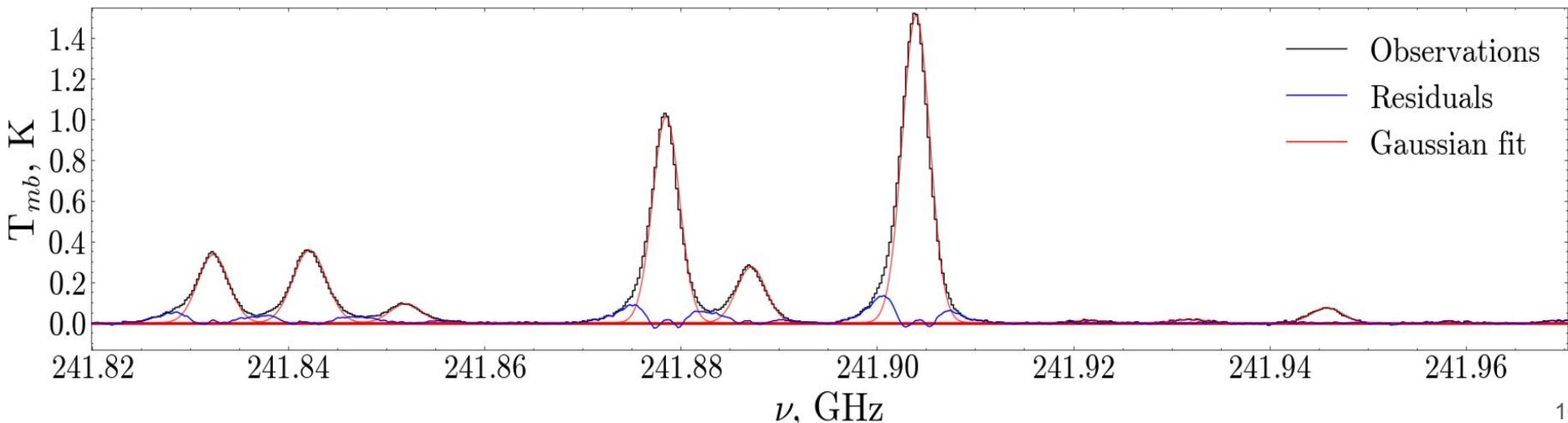
1. Определяется текущий максимум интенсивности в спектре.
2. Вписывается Гауссов профиль
3. Приближенные наблюдения вычитаются из спектра



Повтор шага 1., 2., 3. пока текущий максимум интенсивности не достигнет уровня 3σ , где σ - уровень шума.

Используемые для приближения инструменты и методы

- Минимизируется разница $\sum_{i=0}^n [y_i - f(x_i)]^2$ с помощью метода наименьших квадратов.
- Полученные на выходе центральные частоты затем сопоставляются с частотами молекул из базы данных CDMS и JPL.



Критерии отбора и ограничения отождествления

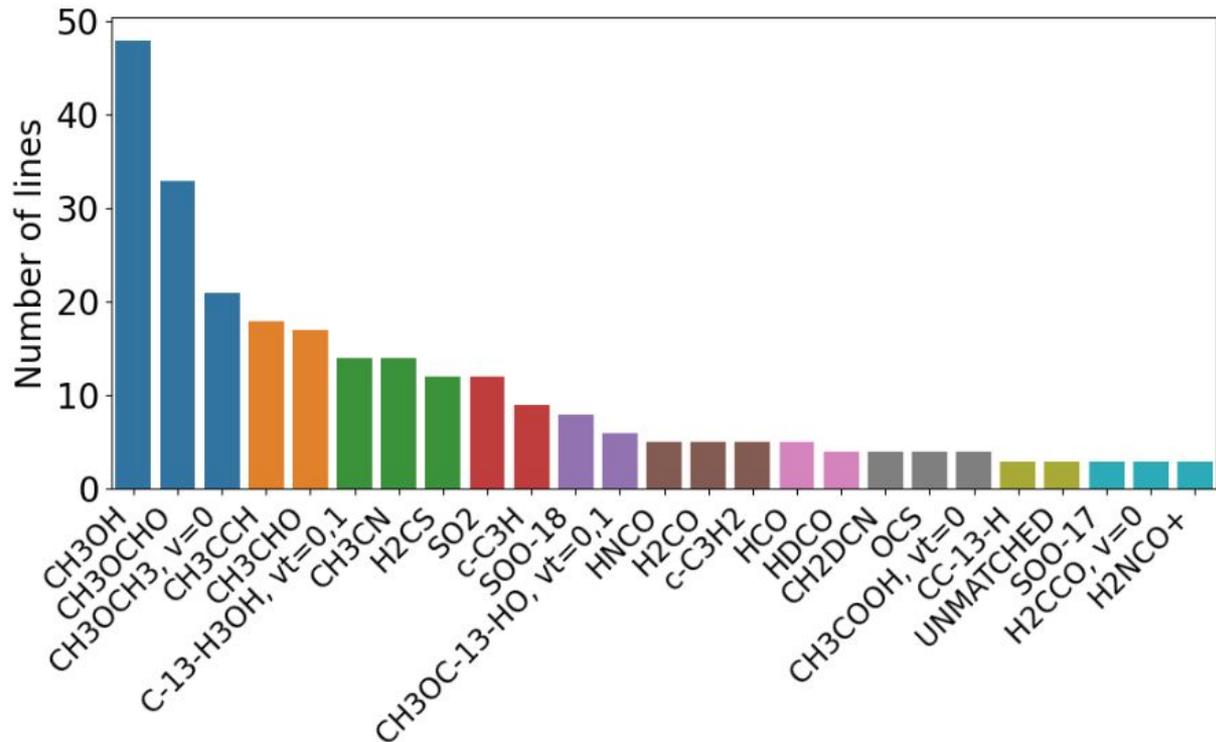
- Алгоритм выбора молекул основан на многоуровневом подборе молекул-кандидатов из базы данных CDMS и JPL
- Учитываются молекулы, отождествленные в МЗС, и их изотопологи.
- Отбор проводится по частоте, энергии верхнего уровня (E_u), и логарифму коэффициента Эйнштейна спонтанного перехода ($\log_{10} A_{ij}$).

Уровень	$\Delta \nu$, ГГц	E_u , К	$\log_{10} A_{ij}$
1	± 0.0005	≤ 200	$\geq 10^{-7}$
2	± 0.001	≤ 400	$\geq 10^{-8}$
3	± 0.002	≤ 800	$\geq 10^{-9}$
4	± 0.003	≤ 1000	$\geq 10^{-10}$

Отождествленные молекулы

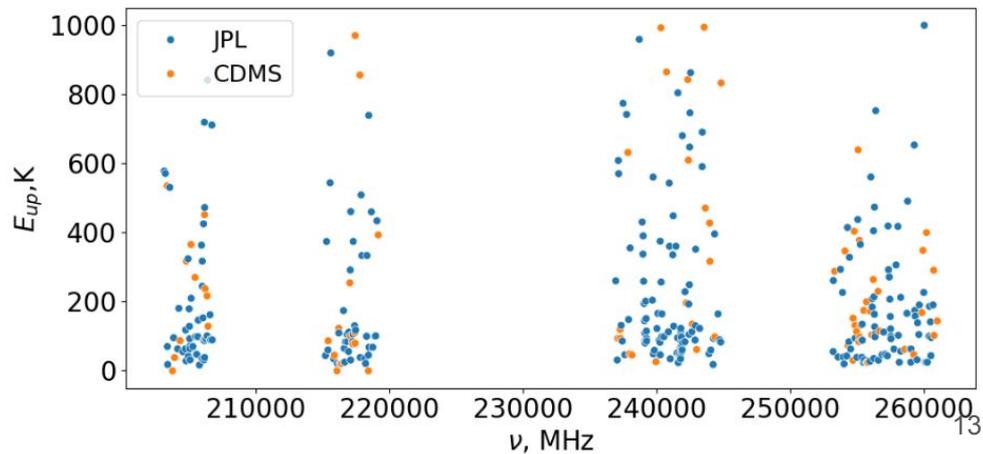
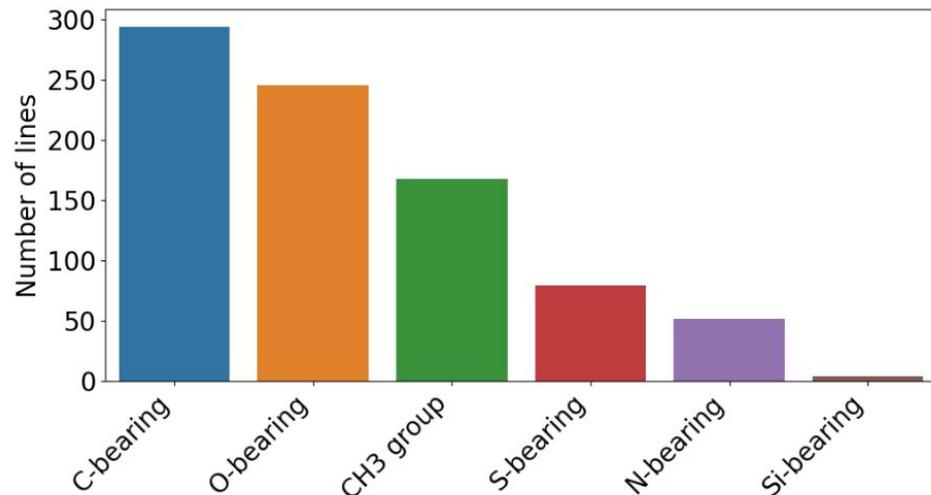
30 молекул, для
которых было
отождествлено >3
линий

время ~ 8 минут/спектр,
порог отождествления - 7σ

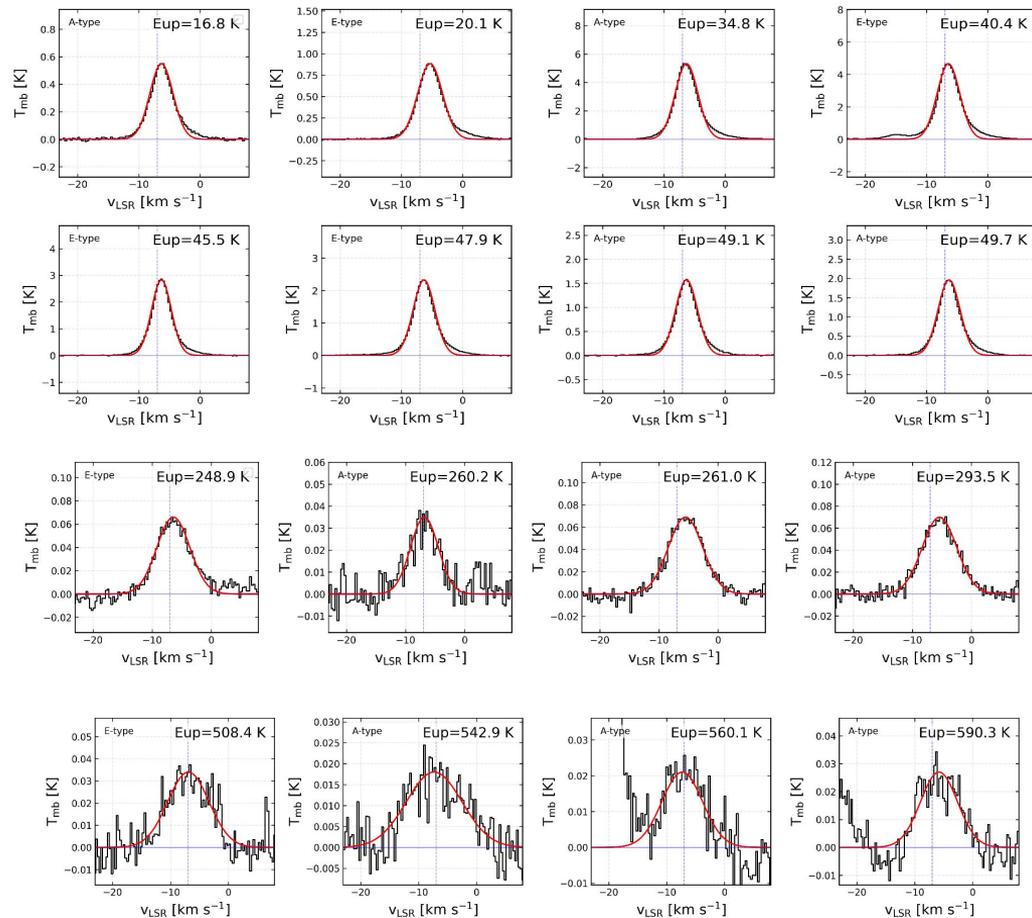
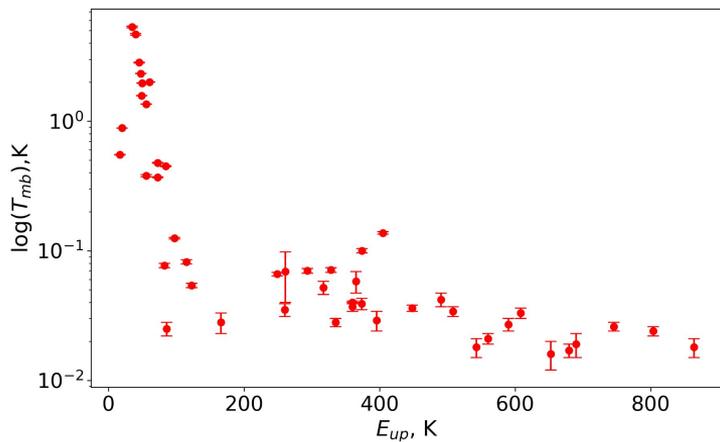


Отождествленные молекулы

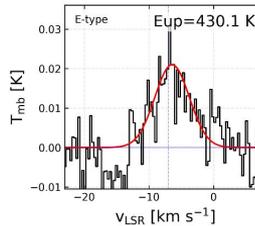
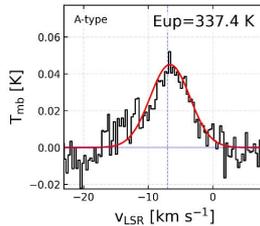
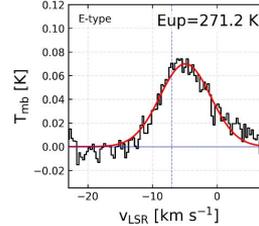
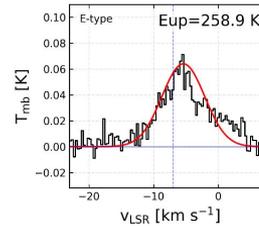
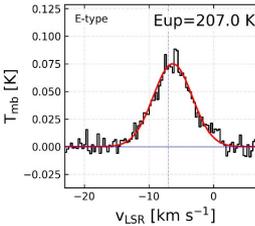
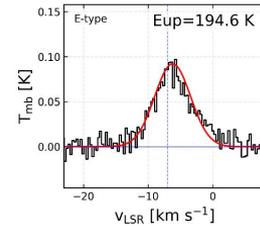
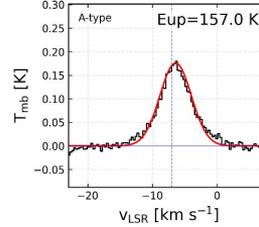
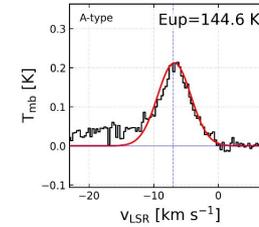
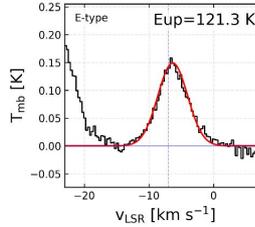
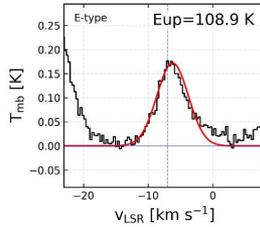
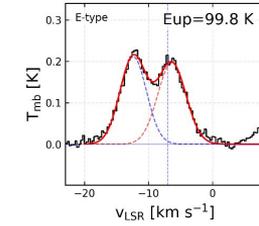
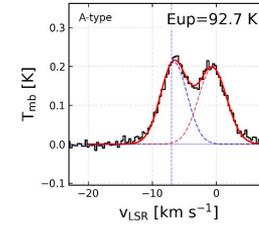
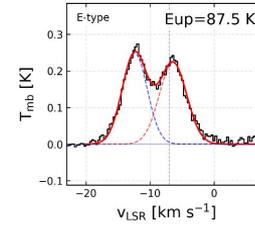
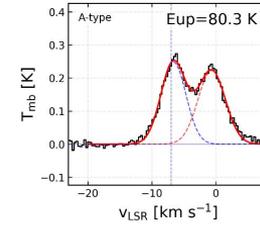
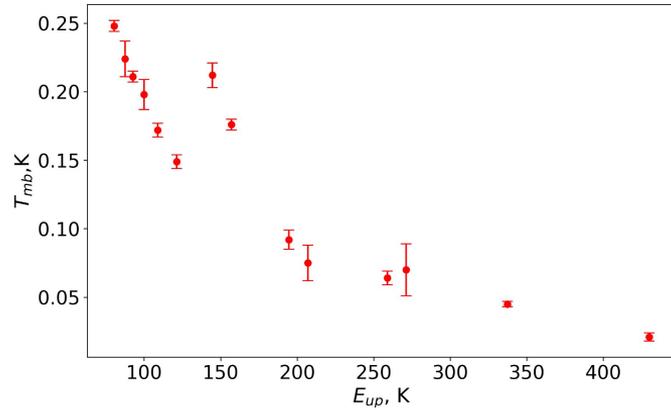
- Всего: 407 линий 79 молекул в 6 диапазонах, из которых 316 из базы JPL
- Самая распространенная: CH_3OH



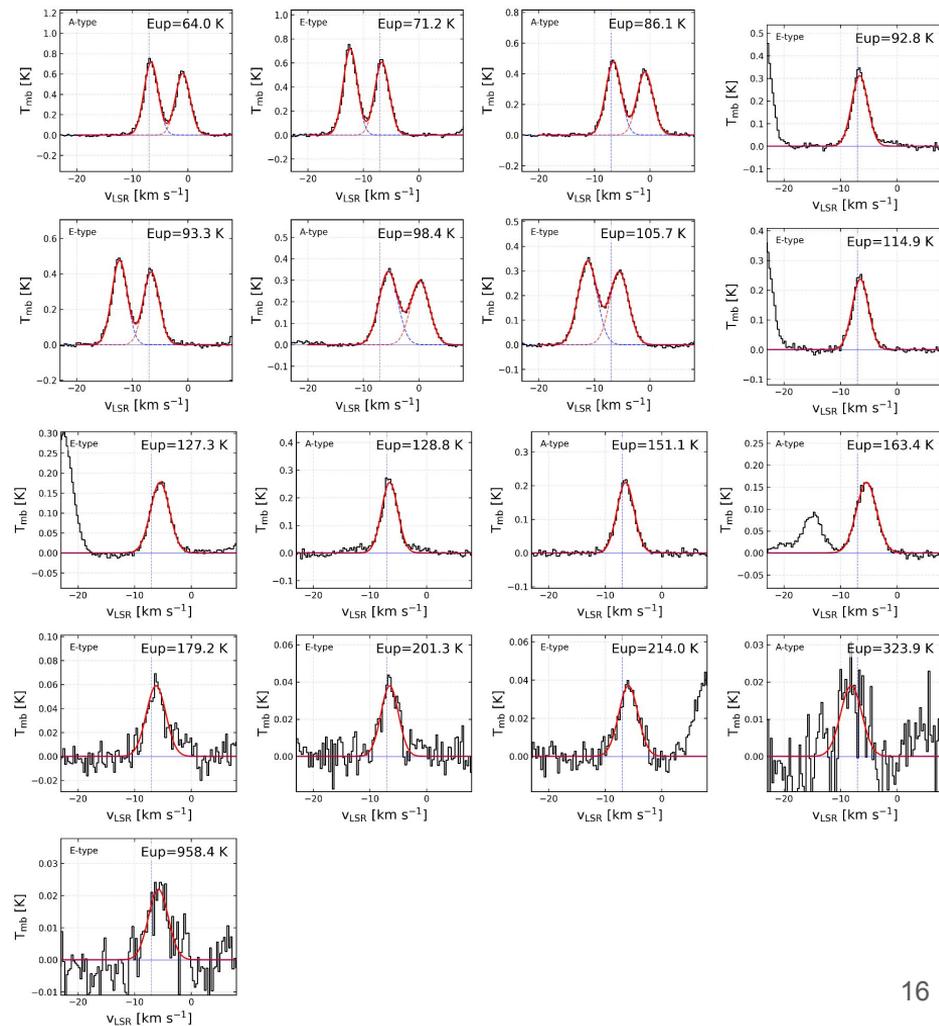
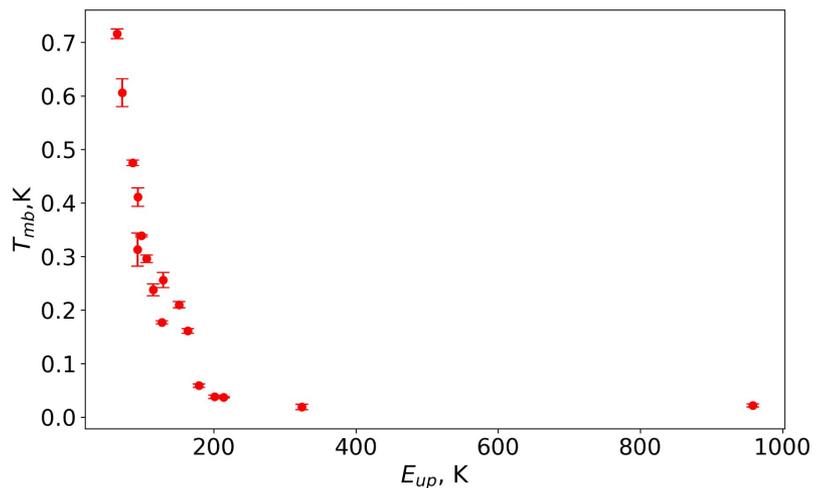
Пример: профили линий CH₃OH



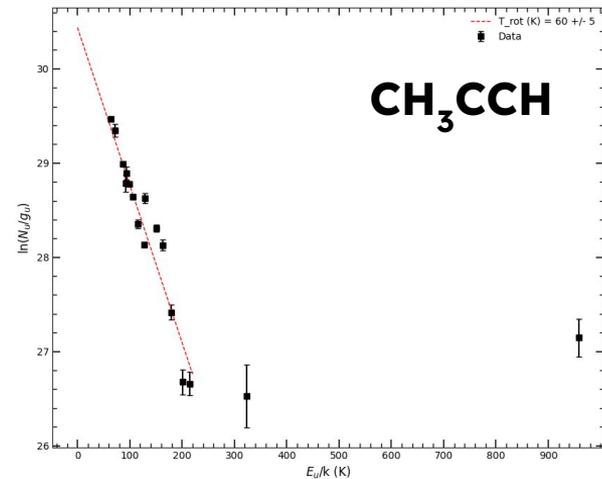
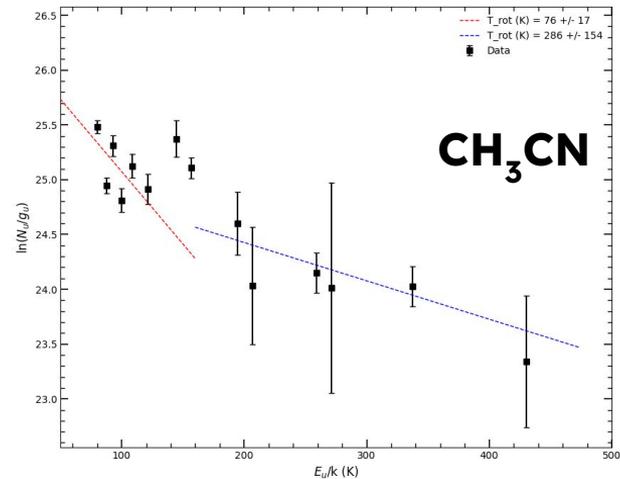
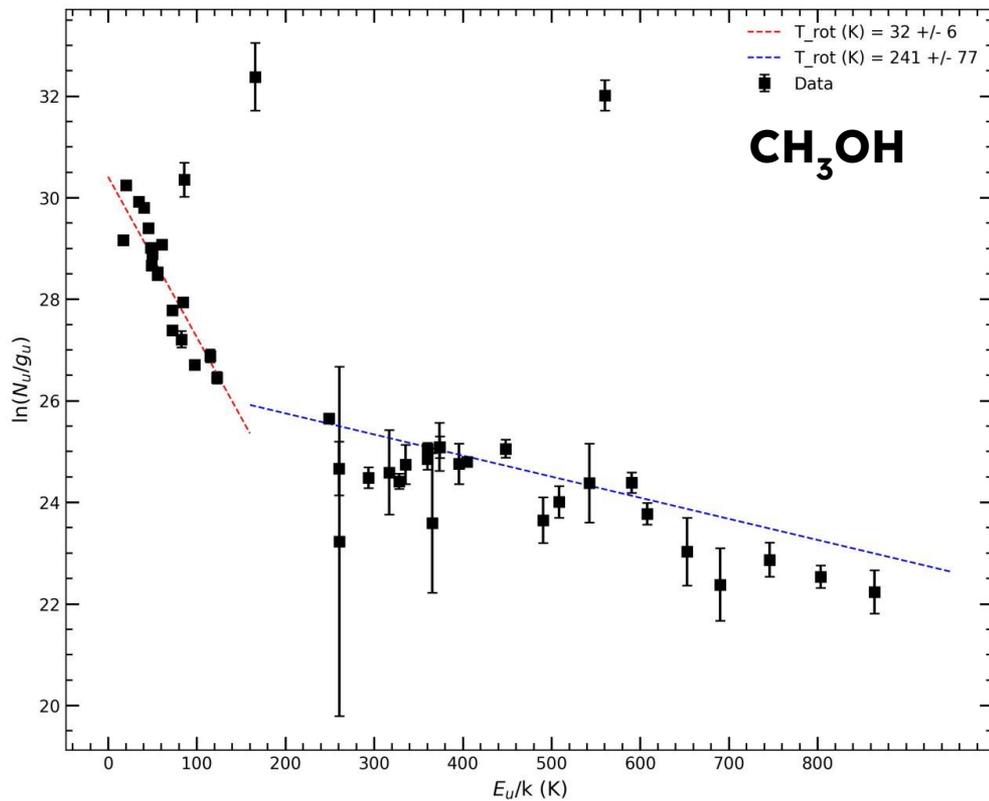
Пример: профили линий CH₃CN



Пример: профили линий CH₃CCH



Вращательные диаграммы CH_3OH , CH_3CN , CH_3CCH



Заключение

- Разработан алгоритм для автоматического отождествления молекул и получения параметров спектральных линий.
- В спектрах горячего ядра RCW 120 YSO S2 были отождествлены >400 линий излучения 79 молекул, включая простые 2-х атомные (SiO) и сложные (до 9 атомов: C₂H₅CN) органические соединения. Самая распространенная молекула – CH₃OH.
- Определены температуры горячей части ядра и холодной части оболочки.
- В дальнейшем: химико-динамическая модель горячего ядра для исследования синтеза сложных органических соединений.

Спасибо за внимание!

Работа была поддержана грантом РФФ 24-22-00097