

Աստղաքիմիա

Արարատ Եղիկյան

Բովանդակություն

1. Ներածություն
2. Մոլեկուլային սպեկտրեր
3. Մոլեկուլային ջրածինը միջաստղային ամպերում
4. Մոլեկուլային ռեակցիաները գազային ֆազայում
5. Մոլեկուլների քայքայումը
6. Ռեակցիաների կինետիկան
7. Պարունակության հաշվարկներ
8. Դիտումների արդյունքներ
9. Պոլիցիկլիկ արոմատիկ ածխաջրածիններ
10. Աստղակենսաբանության տարրեր

1. Ներածություն

Մոլեկուլների առկայությունը (CN, CH և CH+) միջաստղային տարածության մեջ հայտնի էր արդեն 1930-ականների վերջից: Ավելի առատ մոլեկուլները հայտնաբերվեցին ավելի ուշ, օրինակ ամենաառատ մոլեկուլը ոչ միայն միջաստղային շրջաններում, այլ նաև ամբողջ Տիեզերքում՝ H_2 -ը նույնացվեց 1970 թ. արտամթնոլորտային դիտումների շնորհիվ՝ գրանցելով համապատասխան ուլտրամանուշակագույն Լայմանի կլանման շերտը ξ Per աստղի ուղղությամբ: Այլ առատ մոլեկուլներ՝ հիդրոքսիլը (OH), ջրի գոլորշին (H_2O), ամոնիակը (NH_3), ֆորմալդեհիդը (H_2CO), ածխածնի օքսիդը (CO), դիտվել են նույն ժամանակահատվածում միլիմետրային («մմ») և սանտիմետրային («սմ») ալիքների ռադիոդիտումներով:

Այսօր, 2025 թ. դրությամբ, միջաստղային միջավայրում (ՄԱՆ-ում) գրանցվել է ավելի քան 300 մոլեկուլ

(<https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/molecules>): Դրանք ներառում են 2–12 ատոմ պարունակող մոլեկուլներ, ինչպես նաև ավելի բարդ կառուցվածքներ՝ ավելի քան 12 ատոմներով, օրինակ՝ C_{60} (ֆուլերեն) կամ $C_{24}H_{12}$ ՝ PAH (coronene), պոլիցիկլիկ արոմատիկ ածխաջրածին:

Այս մոլեկուլները դիտվել են միջաստղային ամպերում, մոլորակների մթնոլորտներում, գիսավորներում, աստղային մթնոլորտներում և թաղանթներում, Հերբիգ–Հարո օբյեկտներում, աստղառաջացման շրջաններում, H II տիրույթներում, մոլորակաձև միգամածություններում, գերնորերի թաղանթներում և դրանց մնացորդներում, ինչպես նաև ակտիվ գալակտիկաներում:

ՄԱՆ-ում մոլեկուլները հիմնականում կենտրոնացած են խիտ և մոլեկուլային ամպերում և հիմնականում ներկայացված են ածխածին պարունակող հիդրիդներով, հասարակ օքսիդներով, սուլֆիդներով, ագետիլենի ածանցյալներով, ալդեհիդներով, ալկոհոլներով, եթերներով, ինչպես նաև այս ընտանիքների որոշ ցիկլիկ մոլեկուլներով և ռադիկալներով: Մոլեկուլների մեծ մասը չեզոք է, սակայն դիտվում են նաև իոններ: Բացի այդ, հանդիպում են ատոմների իզոտոպներից կազմված մոլեկուլներ: Օրինակ՝ CO-ն դիտվել է բոլոր հնարավոր իզոտոպային կոմբինացիաներով՝ ^{12}C , ^{13}C և ^{16}O , ^{17}O , ^{18}O :

2. Մոլեկուլների սպեկտրներ

Մոլեկուլի էներգետիկ մակարդակները հիմնականում պայմանավորված են երեք բաղադրիչներով (ըստ էներգիայի նվազման)՝

Էլեկտրոնային էներգիա – n քվանտային թվի փոփոխությունը պայմանավորում է տեսանելի և գերմանուշակագույն սպեկտրալ գծերը:

Տատանողական էներգիա – v քվանտային թվի փոփոխությունը համապատասխանում է ինֆրակարմիր սպեկտրալ գծերին:

Պատտողական էներգիա – J քվանտային թվի փոփոխությունը պայմանավորում է միլիմետրային («մմ») սպեկտրալ գծերը:

Ընդհանրապես ասած, սպեկտրալ գիծը կարող է ընդգրկել բոլոր երեք նշված մեծությունների փոփոխությունները:

1.1. Էլեկտրոնային վիճակներ

Մոլեկուլի հիմնական էլեկտրոնային վիճակը նշվում է **X** տառով: Գրգռված վիճակները, որոնց կարելի է հասնել հիմնական վիճակից դիպոլային անցումներով, նշանակվում են **A**, **B**, **C** և այլն: Փոքրատառ **a**, **b**, **c** և այլն նշումները կիրառվում են տարբեր սպինային պատիկություն ունեցող վիճակները միմյանցից տարբերելու համար:

Էլեկտրոնային անկյունային **L** մոմենտը և **S** սպինային անկյունային մոմենտը վեկտորապես գումարվում են՝ առաջացնելով լրիվ էլեկտրոնային անկյունային մոմենտը, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, ինչպես դա տեղի է ունենում ատոմների դեպքում: Երկատոմ մոլեկուլում, համաչափության առանցքն ուղղված է երկու միջուկները միացնող ուղղությամբ և էլեկտրոնային անկյունային **A** մոմենտը տեղակայված է առանցքի ուղղությամբ և քվանտացվում է Λ քվանտային թվերով: Համապատասխան վիճակները (թերմային նշանները) $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi$, և այլն, համապատասխանում են Λ -ի 0, 1, 2, 3, և այլն արժեքներին:

Ինչպես ատոմների դեպքում, ոչ զրոյական **A**-ի համար էներգետիկ վիճակները ենթարկվում են **L-S** (կամ նմանատիպ) կապի ազդեցությանը, քանի որ էլեկտրոնների ուղեծրային շարժումը ստեղծում է մագնիսական դաշտ միջուկային առանցքի ուղղությամբ, որը փոխազդում է էլեկտրոնային սպինի (մագնիսական մոմենտի) հետ:

Գումարային էլեկտրոնային սպինը նշվում է **S**-ով և կարող է ունենալ ամբողջ կամ կես ամբողջ արժեքներ: **S**-ը որոշում է մակարդակի պատիկությունը, քանի որ համաչափության առանցքի ուղղությամբ սպինի պրոյեկցիան՝ **M_s**, կարող է ընդունել **2S + 1** տարբեր արժեքներ (երբեմն **M_s**-ը նշանակվում է **Σ**-ով):

Գումարային էլեկտրոնային անկյունային մոմենտի պրոյեկցիան համաչափության առանցքի նկատմամբ տրվում է՝

$$\Omega = |L + \Sigma|$$

Այսպիսով, երկատոմ մոլեկուլի էլեկտրոնային վիճակը սովորաբար նշվում է $(2S+1)A_{\Omega}$, թեև գործնականում Ω -ն հաճախ բաց է թողնվում:

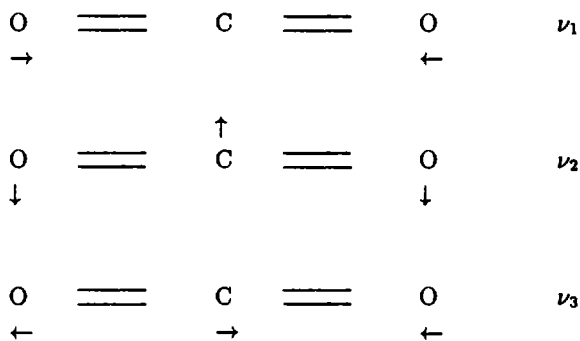
Կան ևս երկու նշանակումներ, որոնք վերաբերում են էլեկտրոնային ալիքային ֆունկցիայի համաչափությանը: Վերին ցուցիչները «+» կամ «-» կիրառվում են **Σ** վիճակների համար և ցույց են տալիս՝ արդյոք ալիքային ֆունկցիայի նշանը փոխվում է երկու միջուկներով անցնող հարթության նկատմամբ անդրադարձման ժամանակ: Ստորին ցուցիչները «u» (կենտ, *ungerade*) կամ «g» (զույգ, *gerade*) բնութագրում են ալիքային ֆունկցիայի նշանի փոփոխությունը սկզբնականի նկատմամբ անդրադարձման ժամանակ՝ պայմանով, որ մոլեկուլի ատոմները նույն լիցքն ունեն:

3.2 Տատանողական վիճակներ

Միջուկները մոլեկուլում տատանվում են միմյանց նկատմամբ որոշակի պոտենցիալի ներգործությամբ, ընդ որում էներգետիկ մակարդակների դեպքում նման է սովորական հարմոնիկ օսցիլյատորի պոտենցիալին, իսկ էներգիայի աճի դեպքում աստիճանաբար շեղվում է հարմոնիկությունից և ի վերջո կարող է հանգեցնել դիսոցիացիայի: Նման վիճակները բնութագրվում են **v** քվանտային թվով:

Ավելի բարդ մոլեկուլները (օրինակ՝ **CO₂**) կարող են ունենալ մի քանի անկախ տատանման հնարավորություններ, որոնք նշանակվում են ν_1, ν_2, ν_3 , և այլն: Օրինակ՝ **CO₂**-ում, որտեղ որտեղ ածխածնի (C) ատոմը գտնվում է կենտրոնում,

իսկ թթվածնի (O) ատոմները՝ եզրերում, գոյություն ունեն երեք հիմնական տատանողական վիճակներ, որտեղ երկուսը սեղմող են (stretching) և մեկը՝ ծռող (bending):



Նկար 1. CO₂-ի տատանողական վիճակները, ν_1 (ալիքի երկարությունը 7.22 մկմ) և ν_3 (4.27 մկմ) որպես սեղմող, և ν_2 (14.97 մկմ) որպես ծռող:

Տատանողական մակարդակի էներգիան մոտավորապես ներկայացվում է որպես հարմոնիկ օսցիլյատորների գումար.

$$E_V = \left(\nu_1 + \frac{1}{2}\right) h\nu_1 + \left(\nu_2 + \frac{1}{2}\right) h\nu_2 + \left(\nu_3 + \frac{1}{2}\right) h\nu_3 + \dots$$

Վիճակը նկարագրվում է ($\nu_1, \nu_2, \nu_3 \dots$) համապատասխան թվերի բազմությամբ:

3.3 Պոտտողական վիճակներ

Մոլեկուլների դասակարգումը ըստ իներցիայի մոմենտների.

Մոլեկուլները, ըստ իներցիայի մոմենտների արժեքների, դասակարգվում են հետևյալ տիպերի (վերնից ներքև, նկարում)

- ☐ գծային,
- ☐ համաչափ կամար (*symmetric top*),
- ☐ սֆերիկ կամար (*spherical top*),
- ☐ ոչ համաչափ կամար (*asymmetric top*):

$I_A = 0, I_B = I_C \neq 0$	Linear molecule	CO ₂ , N ₂ O, O ₂ , N ₂ , CO
$I_A \neq 0, I_B = I_C \neq 0$	Symmetric top	NH ₃
$I_A = I_B = I_C$	Spherical top	CH ₄
$I_A \neq I_B \neq I_C$	Asymmetric top	H ₂ O, O ₃

Նկար 2. Մոլեկուլների տարատեսակներն ըստ իներցիայի մոմենտի արժեքների:

Պոտտողական էներգիան հանդիսանում է մոլեկուլի էներգետիկ մակարդակի երեք հիմնական ներդրողներից նվազագույնը: Պոտվող մոլեկուլները, ըստ իներցիայի մոմենտների արժեքների, դասակարգվում են չորս հիմնական

տիպի (նկար 2): Մոլեկուլի պտտողական անկյունային իմպուլսի մոմենտը քվանտացվում է և բնութագրվում է J քվանտային թվով:

3.3.1. Գծային մոլեկուլներ

Դիպոլային ճառագայթումը հնարավոր է միայն այն դեպքում, երբ մոլեկուլը օժտված է մշտական դիպոլային մոմենտով: Համամիջուկային մոլեկուլները, ինչպիսին է օրինակ H_2 -ը, նման մոմենտ չունեն և կարող են ճառագայթել միայն շատ քիչ հավանական անցումներով: Նմանապես, CO_2 -ը մշտական դիպոլային մոմենտ չունի և, հետևաբար, չունի մաքուր պտտողական սպեկտր:

Մյուս կողմից, CO մոլեկուլն ունի մաքուր պտտողական սպեկտր, որը չափազանց կարևոր է միլիմետրային ալիքների տիրույթում և լայնորեն օգտագործվում է որպես սառը մոլեկուլային գազի հետազոծիչ: CO -ի $J = 1 \rightarrow 0$ և $J = 2 \rightarrow 1$ անցումները, ինչպես ^{12}CO , այնպես էլ ^{13}CO իզոտոպների համար, լայնորեն կիրառվում են մոլեկուլային ամպերի քարտեզագրման մեջ:

Պտտվող գծային մոլեկուլի էներգետիկ մակարդակները համեմատական են $J(J + 1)$ արտահայտությանը՝ փոքր շտկումով, որը պայմանավորված է մոլեկուլի ձգվելու ազդեցությամբ:

Գծային մոլեկուլների միջուկային համաչափությունը կարող է դասակարգվել որպես «s» կամ «a» (*symmetric* կամ *antisymmetric*): Պտտողական անցումների ընտրության օրենքն է՝

$$\Delta J = \pm 1$$

ընդ որում $J = 0 \rightarrow J = 0$ անցումը թույլատրված չէ:

3.3.2. Մֆերիկ կամարներ

Միանշանակ համաչափության առանցքների բացակայության պատճառով սֆերիկ կամարները օժտված են նույն էներգետիկ մակարդակների կառուցվածքով, ինչ գծային մոլեկուլները: Միակ տարբերությունը պայմանավորված է մակարդակների վիճակագրական կշիռներով:

3.3.3. Համաչափ կամարներ

Համաչափ կամարների դեպքում անկյունային մոմենտի բաղադրիչը համաչափության առանցքի ուղղությամբ քվանտացվում է և բնութագրվում է K քվանտային թվով: K -ն ամբողջ թիվ է, դրական կամ զրո, և բավարարում է պայմանին՝

$$K \leq J$$

Մաքուր պտտողական անցումը բնութագրվում է սկզբնական և վերջնական վիճակների J և K քվանտային թվերով: Համաչափ կամարները դասակարգվում են որպես

- **ձգված (prolate)**, եթե $A > B$,
- **տափակացված (oblate)**, եթե $A < B$:

Համաչափ կամարների էներգետիկ մակարդակները տրվում են հարաբերությամբ՝

$$E \propto BJ(J+1) + (A-B)K^2$$

որտեղ A և B -ն պտտողական հաստատուններ են և հակադարձ համեմատական են համապատասխան իներցիայի մոմենտներին՝ I_A և I_B :

Պտտողական անցումների ընտրության օրենքներն են՝

$$\Delta K = 0, \Delta J = 0, \pm 1$$

ընդ որում $J = 0 \rightarrow J = 0$ անցումը թույլատրելի չէ:

3.3.4 Ոչ համաչափ կամարներ

Ոչ համաչափ կամարները միջանկյալ դիրք են զբաղեցնում ձգված և տափակացված համաչափ կամարների միջև: Այս դեպքում K քվանտային թիվը դադարում է օգտակար լինելուց, և պտտողական վիճակները բնութագրվում են միայն J քվանտային թվով:

Տրված J արժեքին համապատասխան պտտողական վիճակը պարունակում է $2J + 1$ տարբեր էներգետիկ մակարդակներ: Պտտողական անցումների ընտրության օրենքն է՝

$$\Delta J = 0, \pm 1$$

ընդ որում $J = 0 \rightarrow J = 0$ անցումը թույլատրված չէ:

Քանի որ ոչ համաչափ կամարների դեպքում պտտողական էներգիան այլևս J -ի մոնոտոն ֆունկցիա չէ, ΔJ -ի բոլոր երեք արժեքները հանգեցնում են դրական էներգետիկ թռիչքների (կլանման սպեկտրում): Այդ անցումները խմբավորվում են հետևյալ բաժանմունքներում.

- ☐ $\Delta J = -1$ — P բաժանմունք
- ☐ $\Delta J = 0$ — Q բաժանմունք
- ☐ $\Delta J = +1$ — R բաժանմունք

3.3.5. Օրինակ 1: Ջրի մոլեկուլը – H_2O : Քանի որ երկու ջրածնի ատոմների սպինները կամ զուգահեռ են, կամ հակազուգահեռ, գոյություն ունեն **զուգահեռ (ortho) ջուր** և **հակադարձ (para) ջուր** տեսակները, որոնք սովորաբար հանդիպում են 3:1 հարաբերությամբ:

Ջրի սպեկտրի տատանողական մոդերն են (the modes) երեքը, ν_1, ν_2, ν_3 , որոնցից ամենացածր հաճախությամբ մոդը ν_2 –ն է, և կազմում է 1595 cm^{-1} ($6.25 \text{ }\mu$): Մյուս երկուսը՝ ν_1 և ν_3 , համապատասխանում են $2.74 \text{ }\mu$ և $2.66 \text{ }\mu$ երկարությունների շերտերին:

3.3.6. Օրինակ 2: Մոլեկուլյար ջրածինը – H_2 : Այդ մոլեկուլի էլեկտրոնային հիմնական վիճակն է $X^1\Sigma_g^+$: Այստեղ՝

- ☐ X-ն նշանակում է **մեկնային հիմնական վիճակ**,
- ☐ 1 ցույց է տալիս **պատիկությունը** ($S = 0$),
- ☐ Σ նշանակում է, որ էլեկտրոնային անկյունային մոմենտի բաղադրիչը համաչափության առանցքի երկայնքով 0 է, և այլն:

4. Մոլեկուլային ջրածինը միջաստղային ամպերում

Ամենաառատ մոլեկուլը միջաստղային տարածությունում H_2 մոլեկուլն է, որը կազմում է դիֆուզ ամպերի մի մասը և գրեթե ողջ զանգվածը՝ խիտ ամպերում: Ջրածինը, թե՛ ատոմային, թե՛ մոլեկուլային տեսքով, կապված է փոշու

հատիկների առկայության հետ: Ներկայացնում ենք նաև, որ մոլեկուլային ջրածինը առավել արդյունավետ է առաջանում հենց փոշու հատիկների վրա:

Մոլեկուլային ջրածնի առաջացման հնարավորությունը գազային ֆազայում

Մոլեկուլային ջրածնի առաջացման համար անհրաժեշտ է, որպեսզի երկու ջրածնի ատոմ բախվեն, երբ գազի կոնցենտրացիան n_H է, իսկ ջերմաստիճանը՝ T ամպում: Ատոմների արագությունը կարող ենք գնահատել՝

$$v_H \sim \sqrt{kT/m_H}, \quad (1)$$

րոնք պետք է մոտենան իրար d հեռավորության վրա: Ընդունելով բախման կտրվածքը $\sim \pi d^2$, կարելի է գնահատել բախման ժամանակը՝

$$t_c \sim \frac{1}{\pi d^2 n_H v_H}. \quad (2)$$

Ընդունելով $d \approx 3 \text{ \AA}$, $T \approx 100 \text{ K}$ և $n_H \approx 10^4 \text{ cm}^{-3}$, ստանում ենք $t_c \approx 10^7$ վրկ:

Նույնիսկ ամենախիտ ամպերի համար ($n_H \approx 10^7 \text{ cm}^{-3}$), բախման ժամանակը կազմում է մոտ $t_c \approx 10$ վրկ: Ստացված արժեքները շատ մեծ են՝ ցույց տալով, որ համապատասխան քիմիական ռեակցիաները շատ դանդաղ են համեմատած, օրինակ, Երկրի մթնոլորտում ընթացող գործընթացների հետ:

Մոլեկուլային ջրածնի առաջացումը պինդ (փոշու) ֆազայի օգնությամբ

Մոլեկուլային ջրածնի առաջացած ատոմներից ավելցուկային էներգիան հեռացնելու համար երրորդ մարմնի դեր կարող է խաղալ փոշու հատիկի մակերևույթը, ինչը հնարավորություն է տալիս մոլեկուլի կայունացմանը: Մոլեկուլի առաջացման արագությունը կարելի է գնահատել ատոմների և փոշու հատիկների միջև բախումների արագությունից:

Դիտարկենք a շառավղով և n_d կոնցենտրացիայով սֆերիկ փոշու հատիկներ: Քանի որ մատչելի մակերեսը բախումների համար միավոր ծավալում $\pi a^2 n_d$ է, իսկ ատոմների հոսքը՝ $v_H n_H$, ապա մոլեկուլների առաջացման արագությունը (միավոր ծավալում և մեկ վայրկյանում) կլինի

$$\frac{dn_{H_2}}{dt} \sim \frac{1}{2} \pi a^2 n_d n_H v_H, \quad (3)$$

որտեղ $1/2$ բազմապատկիչը հաշվի է առնում արագությունների ուղղությունների հնարավոր տարբեր կողմնորոշումը: Այստեղ ենթադրվում է, որ բոլոր ջրածնային ատոմները բախվելով հատիկներին, կաչում են դրանց և էֆեկտիվորեն ապահովում են մոլեկուլի առաջացումը: Այստեղ ենթադրվում է, որ բոլոր ջրածնի ատոմները, բախվելով հատիկներին, կաչում են դրանց և

արդյունավետ ապահովում մոլեկուլի առաջացումը: Ավելի ճշգրիտ հաշվարկները ընդգրկում են նաև ադսորբցիան և մոլեկուլի առաջացման հավանականությունը:

Օգտագործելով միջին արժեքները, $a \approx 1000 \text{ \AA} = 10^{-5} \text{ սմ}$, $n_d/n_H \sim 10^{-11}$, $T \sim 100 \text{ K}$, $v_H \sim 10^5 \text{ սմ/վ}$, կարգի ճշտությամբ ստանում ենք

$$\frac{dn_{H_2}}{dt} \sim 10^{-16} n_H^2 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}. \quad (4)$$

Օրինակ, $n_H \sim n_{H_2} \sim 10^2 \text{ սմ}^{-3}$ դեպքում, $dn_{H_2}/dt \sim 10^{-12} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$.

Մոլեկուլի քայքայումը տեղի է ունենում ամպի եզրին, ճառագայթման կլանման հետևանքով, և այդ երևույթը պաշտպանում է ավելի ներքին տիրույթներում գտնվող մոլեկուլները ֆոտոդիսոցիացիայից: Եթե սյունակային խտությունը փոքր է $N_{H_2} \leq 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, ապա քայքայման տեմպը մեծ է, մոտ 10^{-10} վ^{-1} , և միջավայրը մոլեկուլային չէ, այլ ատոմային է: Ի դեպ, այդ շեմային արժեքը ստացվում է նաև մոլեկուլային ջրածնի ֆոտոքայքայման հնարավորությունից մոլեկուլային լայմանյան գծերում, որի կտրվածքն է մոտ $\sigma(H_2) \cong 10^{-14} \text{ cm}^2$, որտեղից անմիջապես հետևում է նշված շեմային արժեքը սյունակային խտության համար: Իրոք, $\tau \leq 1 = \sigma(H_2) \cdot N_{H_2}$, որտեղից ստացվում է $N_{H_2} \leq 10^{14} \text{ cm}^{-2}$:

Ավելի խիտ միջավայրում քայքայման տեմպը պակասում է ուղիղ համեմատական խտության արժեքին, այսինքն սկսած $N_{H_2} \geq 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ արժեքից մոլեկուլների առաջացումը հավասար է քայքայման տեմպին, և էլ ավելի մեծ արժեքների դեպքում գերակշռում է քայքայումը: Ընդհանրապես, մոլեկուլային ջրածնի ձևավորումը տեղի է ունենում, երբ բախումների հաճախությունը, τ_c սկսում է գերազանցել գոլորշիացման արագությանը, τ_e , որպեսզի մակերևույթին կպած ջրածնի ատոմը հասցնի մոտենալ մյուս ատոմին և միավորվի, այսինքն՝ $\tau_c > \tau_e$:

Բախման արագությունը գնահատվում է $\tau_c \sim \pi a^2 n_H v_H$, կամ $\tau_c \sim 10^{-3} \text{ վ}^{-1}$, $T \sim 100 \text{ K}$ դեպքում: Գոլորշիացումը ավելի արագ է, բայց քվանտա-մեխանիկական դիտարկումները ցույց են տալիս բախման արագությանը մոտ ժամանակ, այսինքն մոլեկուլը հասցնում է ձևավորվել:

Միջաստղային H_2 մոլեկուլի գրանցումը

Առաջին գրանցումը տեղի է ունեցել միջաստղային տիրույթում, էլեկտրոնային անցումներով պայմանավորված սպեկտրալ կլանման գծերում, այսինքն համապատասխան միջաստղային ամպը պետք է համեմատաբար թափանցիկ լիներ: Ավելի խիտ շրջանները դիտելու համար անհրաժեշտ է մմ դիապազոնը, ներգրավելով տատանողական և պտտողական անցումները: Սակայն նման

գծերը կամ արգելված են, կամ շատ թույլ: Ուստի պետք է փորձել այլ մոլեկուլներ, օրինակ CO, որոնք ունեն այդ դիապազոնում համապատասխան ուժեղ գծեր:

CO և H₂ մոլեկուլները միջաստղային նյութում

CO երկրորդն է ըստ առատության մոլեկուլային ամպերում, հասնելով 10^{-4} H₂-ի նկատմամբ: Բախումները այս երկու մոլեկուլների միջև առաջացնում են պտտողական մակարդակների գոգոմանը, որին հաջորդում է ֆոտոնների արտացոլումը մմ դիապազոնում: Նման դիտումները թույլ են տալիս որոշել մոլեկուլի պարունակությունը ջրածնի մոլեկուլի նկատմամբ, ինչպես նաև H₂-ի պարունակությունը ճշգրիտ սանդղակավորման միջոցով:

CO մոլեկուլի դիտումները ցույց են տալիս պայծառության ջերմաստիճանային պրոֆիլը՝ $T_b(\nu)$, որպես ամպի գազի ռադիալ արագության ֆունկցիա կամ, որ նույնն է, հաճախության ֆունկցիա՝ շնորհիվ Դոպլերյան շեղման: CO առաքման ինտենսիվությունը կարելի է արտահայտել որպես

$$I_{CO} = \int T_b(\nu) d\nu, \quad (5)$$

որտեղ ինտեգրումը կատարվում է բոլոր այն արագությունների համար, որոնց վրա առաքումը գրանցվել է: Մոլեկուլի սյունյակային խտությունը կարելի որոշել (5)-ից, օգտագործելով ճառագայթման տեղափոխման հայտնի առանձնահատկությունները:

Մինչդեռ H₂-ի սյունյակային խտության համար կարելի է գրել

$$N_{H_2} = X_{CO} I_{CO}, \quad (6)$$

որտեղ ենթադրվում է, որ N_{H_2} -ի արժեքը համեմատական է CO-ի առաքման ինտենսիվությանը: (5)-ում I_{CO} -ի չափողականությունն է K·km/s, այդ դեպքում $[X_{CO}] = \text{cm}^{-2} \text{K}^{-1} (\text{km/s})^{-1}$: Անհրաժեշտ սանդղակավորումը X_{CO} որոշելու համար կատարում են դիֆուզ ամպերի H₂-ի ԳՄ չափումներից, օգտվելով չեզոք և մոլեկուլային ջրածնի կապից և հաշվի առնելով միջաստղային էքստինկցիան: Միջին արժեքը կազմում է $X_{CO} \sim (1 - 5) \cdot 10^{20} \text{cm}^{-2} \text{K}^{-1} (\text{km/s})^{-1}$, հաճախ օգտագործվում է $4 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-2} \text{K}^{-1} (\text{km/s})^{-1}$ արժեքը: Օրինակ, գալակտիկ հարթության ուղղությամբ, որտեղ պայծառության ջերմաստիճանը $T_b(\nu) \cong 2$ K, մոտավորապես հաստատուն ռադիալ արագությունների ինտերվալում $\Delta\nu \sim 20$ km/s, ունենք $I_{CO} \sim 40$ km/s և $N_{H_2} \cong 1.6 \cdot 10^{22} \sim 10^{22} \text{cm}^{-2}$: Ընդունելով $N_{H_2}/N_{CO} \sim 10^{-4}$, գտնում ենք $N_{CO} \sim 10^{18} \text{cm}^{-2}$: Վերջապես, ենթադրելով ամպի չափի համար մոտ $L \sim 1$ պկ, ջրածնի մոլեկուլների կոնցենտրացիայի համար ստանում ենք $n_{H_2} \sim 10^4 \text{cm}^{-3}$:

Միջաստղային մոլեկուլային ջրածնի կլանման շերտերը. էլեկտրոնային անցումներով պայմանավորված սպեկտր

Միջաստղային մոլեկուլային ջրածինը (H_2) հաճախ նկատվում է կլանմամբ՝ ֆոնային ուլտրամանուշակագույն (UV) պայծառ աստղերի և քվազարների նկատմամբ: Հիմնական սպեկտրալ նշաններն են **Լայմանի** և **Վերների** շերտերը, որոնք համապատասխանում են էլեկտրոնային անցումներին՝ սովորական $X^1\Sigma_g^+$ վիճակից դեպի գրգռված՝ $B^1\Sigma_u^+$ և $C^1\Pi_u$ վիճակներ:

Որտեղ է տեղի ունենում կլանումը

- **Լայմանի շերտեր:** 912–1108 Å
- **Վերների շերտեր:** 910–1000 Å
- Այս շերտերը հայտնվում են որպես նեղ կլանման գծեր, որոնք տեղադրված են ֆոնային աղբյուրների UV շարունակական սպեկտրի վրա:
- Յուրաքանչյուր շերտ բաժանված է բազմաթիվ ռոտացիոն–տատանողական գծերի, որոնք նշվում են v (տատանողական) և J (ռոտացիոն) քվանտային թվերով:

Սպեկտրալ դիտումներ

1. **Copernicus արբանյակ (1970-ականներ):**
 - Առաջին համակարգված դիտումները միջաստղային H_2 կլանման համար:
 - **Հղում:** Savage et al. (1977, *ApJ*, 33, 149) — դասական ուսումնասիրություն OB աստղերի նկատմամբ H_2 կլանման:
2. **FUSE (Far Ultraviolet Spectroscopic Explorer, 1999–2007):**
 - Առաջարկեց բարձր լուծաչափով UV սպեկտրներ H_2 կլանման վերաբերյալ Մերձմոլորակային ամպերում, Մագելանյան ամպերում և բարձր կարմիր փոփոխությամբ համակարգերում:
 - **Օրինակ:** Tumlinson et al. (2002, *ApJ*, 566, 857) — H_2 Մագելանյան ամպերում:
 - Սպեկտրալ տվյալներում կարելի է տեսնել նեղ H_2 կլանման գծերի շարք՝ 912–1120 Å տիրույթում, որոնք հաճախ միավորվում են ատոմային գծերի (օր. HI, մետաղներ) հետ:

Տեսողական օրինակ

Ահա սխեմատիկ պատկեր այն մասին, թե ինչպես է UV սպեկտրն առաջանում տաք աստղի ֆոնի վրա միջաստղային H_2 կլանման դեպքում:

- Տաք աստղի շարունակական սպեկտրը հարթ է հեռավոր UV-ում:
- Սուպերպոզիցիայում՝ բազմաթիվ H_2 կլանման գծեր, որոնք խմբավորված են Լայմանի և Վերների շերտերի մեջ:
- **Օրինակային պատկեր (FUSE տվյալներից):**
 - Rachford et al. (2002, *ApJ*, 577, 221) — «A FUSE Survey of Interstellar Molecular Hydrogen in Translucent Clouds».

Հղումների ցանկ

- Savage, B. D., Drake, J. F., Budich, W., & Bohlin, R. C. (1977). *ApJS*, 33, 149. (Copernicus ուսումնասիրություն H_2 կլանման վերաբերյալ)
- Tumlinson, J., et al. (2002). *ApJ*, 566, 857. (FUSE ուսումնասիրություն Մագելանյան ամպերում H_2 -ի)
- Rachford, B. L., et al. (2002). *ApJ*, 577, 221. (FUSE ուսումնասիրություն թափանցիկ ամպերում)
- Draine, B. T. (2011). *Physics of the Interstellar and Intergalactic Medium* — 6-րդ գլուխը անդրադառնում է H_2 էլեկտրոնային կլանմանը

4. Մոլեկուլային ռեակցիաները գազային ֆազայում

Միջաստղային նյութի ֆիզիկական պայմանները հնարավորություն են տալիս ընթանալու որոշ քիմիական ռեակցիաների: Մոլեկուլային ամպերի ներքին շրջանների ցածր ջերմաստիճանների (5-20 K) պայմաններում հնարավոր են միայն էկզոթերմային ռեակցիաներ, որոնք զուգակցվում են էներգիայի անջատումով, ի տարբերություն էնդոթերմային ռեակցիաների, որոնք պահանջում են էներգիա: Մյուս կողմից, որոշ ռեակցիաներ, նույնիսկ էկզոթերմային, պահանջում են հաղթահարել պոտենցիալ արգելքը (potential, or activation barrier) ռեակցիայի սկսվելուց առաջ: Այսինքն, եթե ջերմաստիճանը այնքան ցածր է, որ այդ արգելքը չհաղթահարվի, ռեակցիան էլի չի կարող սկսվել:

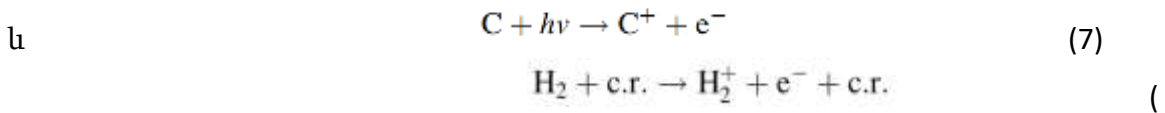
2.1 Վիճակը փոխվում է ֆոտոդիսոցիացիոն և հարվածային ալիքների ազդեցությամբ շրջաններում, որտեղ ջերմաստիճանը ավելի բարձր է (20–100 K):

Այդ պայմաններում հնարավոր են նաև այն ռեակցիաները, որոնք նախկինում արգելքի պատճառով չէին սկսվում, և նույնիսկ որոշ էնդոթերմային ռեակցիաներ կարող են ընթանալ:

2.2 Իոն-մոլեկուլային ռեակցիաները

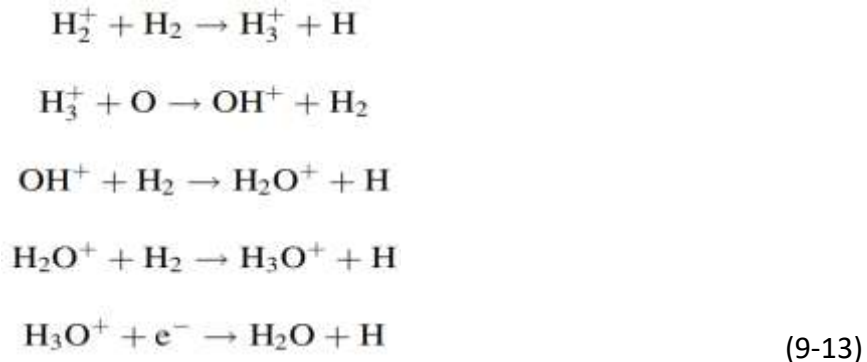
Միջաստղային նյութում այս ռեակցիաները ամենակարևորներն են, որովհետև

մոլեկուլներից մեկի էլեկտրական լիցքը գործում է որպես ձգող ուժ, նպաստելով ռեակցիային: Օրինակ,



8)

Որտեղ նշված իոները առաջանում են կամ ֆոտոնից, կամ էլ տիեզերական ճառագայթման պայմանավորված իոնիզացիայի հետևանքով: Ամպերում, որպես կանոն, այդ ռեակցիաներում մասնակցում է H_2^+ մոլեկուլային իոնը, որը կարող է սկսել հետևյալ ռեակցիաները (9-13):



օրինակ, ջրի ստեղծումով (13) դիսոցիատիվ ռեկոմբինացիայի միջոցով:

Այդ ռեակցիան կարող է փոխարինվել OH առաջացումով

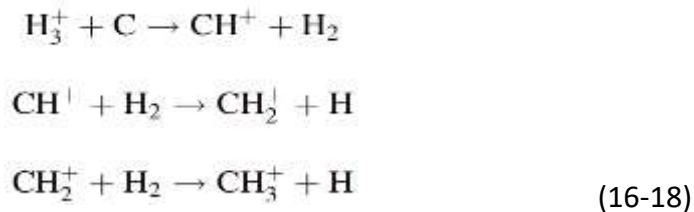


(14)

H_2O , OH -առաջացումը կարող է պատահել նաև հետևյալ ռեակցիայի շնորհիվ, որին հետևում են (11-14) ռեակցիաները:



Ածխածնի քիմիան խիտ ամպերում ևս հիմնված է իոն-մոլեկուլային ռեակցիաների վրա, հատկապես CO -ի առաջացումը: H_3^+ իոնից, որը առաջանում է (9)-ի միջոցով, և նման ձևով, (10-12) ունենք



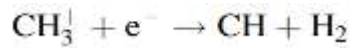
CO -ի առաջացումը իրականացվում է հետևյալ ռեակցիաներով



Դիֆուզ ամպերում ճառագայթումը կարողանում է թափանցել, որի հետևանքով առաջանում է C^+ իոնը, որը H_2 -ի հետ ճառագայթային ասոցիացիայի միջոցով,



որի արդյունքը (CH_2^+), (18-20) նման ռեակցիաներով, կամ առաջացնում է CH կամ CH_2



3)

2.3 Ընդհանրապես, իոն-մոլեկուլային ռեակցիաները մասնակցում են միջաստղային ամպերում դիտվող **ամենաատատ մոլեկուլների առաջացմանը**, ինչպես նաև երկար շղթայական մոլեկուլների սինթեզին, օրինակ՝ HC_9N և HC_{11}N : Նույն մեխանիզմով, NH_2 և NH_3 ռադիկալների մասնակցությամբ, կարող է առաջանալ նաև 2 ատ կարևոր **HCN** մոլեկուլը:

2.4 Նեյտրալ-նեյտրալ ռեակցիաներ

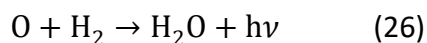
Թեպետ դրանք պակաս արդյունավետ են, չեզոք ատոմ-ատոմ կամ ատոմ-մոլեկուլ բախումները նույնպես կարող են հանգեցնել նոր մոլեկուլների առաջացմանը: Այս դեպքում փոխազդեցությունը համեմատաբար թույլ է, և հաճախ առկա է էներգետիկ արգելք, որը խոչընդոտում է ռեակցիայի ընթացքը:

Ռեակցիան կարող է ընթանալ, եթե բախվող մասնիկները ունեն բավարար էներգիա: Բացի այդ, որոշ դեպքերում հնարավոր է արգելքի հաղթահարումը **քվանտա-մեխանիկական թունելային էֆեկտի** շնորհիվ: Ստորև բերված են նման ռեակցիաների մի քանի օրինակներ:



Առաջին ռեակցիայի դեպքում էներգետիկ արգելքը գործնականում արհամարհելի է, մինչդեռ երկրորդ ռեակցիան դանդաղ է $T \approx$

10 K ջերմաստիճանում և զգալիորեն արագանում է $T \approx 300$ K դեպքում, որտեղ արգելքի դերը արդեն կարևոր է: H_2O մոլեկուլը առաջանում է չեզոք O ատոմից, որը միջաստղային միջավայրում ավելի առատ է, քան O^+ իոնը, որը մասնակցում է (15) ռեակցիային: Հետևաբար, ջրի առաջացումը հիմնականում տեղի է ունենում հետևյալ ռեակցիայի միջոցով.



Այս ռեակցիան էկզոթերմային է, սակայն ունի մոտ 100 K էներգետիկ ակտիվացիոն արգելք: Նման ջերմաստիճաններ կարող են առաջանալ

հարվածային ալիքների ազդեցությամբ, ինչպես նշվել էր վերևում: Նույն պատճառներով կարող են ընթանալ նաև էնդոթերմային ռեակցիաներ՝ ածխածնի և H_2 -ի մասնակցությամբ ածխաջրածինների առաջացման համար, ինչպես նաև ազոտի և H_2 -ի մասնակցությամբ ամոնիակի սինթեզի գործընթացները:

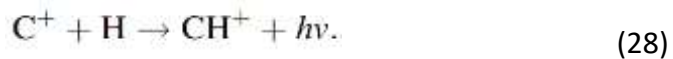
2.5 Ճառագայթային ասոցիացիա

Հետևյալ տիպի ռեակցիաները անվանում են Ճառագայթային ասոցիացիա.



Այստեղ արտազատվող քվանտը իր հետ տանում է ավելցուկային էներգիան, ինչի արդյունքում առաջացած մոլեկուլը այլևս բավարար էներգիա չի ունենում բաժանվելու համար և մնում է կայուն:

Իոն-ատոմ և իոն-մոլեկուլ փոխազդեցությունները նույնպես կարող են ընթանալ նույն մեխանիզմով, օրինակ՝ (21) ռեակցիայի դեպքում:



2.6 Ճառագայթային ռեկոմբինացիա

Այս տիպի ռեակցիաներում իոնը ռեկոմբինացվում է էլեկտրոնի հետ, Ճառագայթելով ֆոտոն: Օրինակ, բացի (15)-ից O^+ իոնը կարող է ձևափոխվել (29) - ի Միջոցով.



2.7 Դիսոցիատիվ ռեկոմբինացիա

Նման ռեակցիաներում մոլեկուլային իոնը ռեկոմբինացվում է էլեկտրոնի հետ, առաջացնելով երկու չեզոք արդյունք



Սրանք ավելի արագ են, քան Ճառագայթային ռեկոմբինացիան: Մյուս օրինակն երևի են (13),(22-23).

3. Լիցքի փոխանակման ռեակցիա

Միջաստղային ամպերում Ճառագայթումը սովորաբար այնքան հզոր չէ, որպեսզի իոնացնի թթվածինը (O), սակայն O^+ իոնը կարող է առաջանալ հետևյալ տեսակի ռեակցիայի միջոցով՝



Պրոտոնները առաջանում են միջաստղային մասնիկների ազդեցությամբ: Ստացված թթվածնի իոնը մասնակցում է ջրի կամ OH ռադիկալի առաջացման գործընթացին՝ ըստ հավասարումների (15):

4. Մոլեկուլի քայքայումը

Վերը նշված ռեակցիաների ժամանակ մոլեկուլները կարող են նաև քայքայվել: Միջաստղային ամպերում մոլեկուլների փոխակերպման հիմնական գործընթացներն են ֆոտոնային և հարվածային դիսոցիացիաները:

Ֆոտոդիսոցիացիա

Դիֆուզ ամպերում ֆոտոդիսոցիացիան մոլեկուլի քայքայման հիմնական գործընթացն է, օրինակ՝



Քայքայման համար անհրաժեշտ ժամանակահատվածը կարելի է գնահատել՝ ընդունելով ԳՄ ճառագայթային հոսքը՝

$$f_{\lambda} \sim F_{\lambda} / h\nu \sim 10^5 \text{ photons} \cdot \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{\AA}^{-1}:$$

Ֆոտոդիսոցիացիայի խտությունը մոտ $\sigma_{ph} \sim 10^{-17} \text{cm}^2$ է $\Delta\lambda \sim 100 \text{\AA}$ շերտում:

Ուրեմն մոլեկուլի կյանքի տևողությունը ֆոտոդիսոցիացիայի պայմաններում կկազմի՝

$$t_{ph} \sim \frac{1}{f_{\lambda} \sigma_{ph} \Delta\lambda} \simeq 300 \text{ years}. \quad (34)$$

Ավելի ճշգրիտ, կարելի է սահմանել ֆոտոդիսոցիացիայի արագությունը, որը շատ նման է ՄԱՆ (Maxwell–Boltzmann) տեսության հիման վրա հայտնի ֆոտոիոնիզացիայի արագությանը՝

$$\beta_{ph} = c \int n_{\lambda} \sigma_{ph} d\lambda, \quad (35)$$

որտեղ n_{λ} ճառագայթման դաշտի ֆոտոնների խտությունն է ($\text{photons} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{\AA}^{-1}$) և ինտեգրումը կատարվում է $\lambda = 912 \text{\AA}$ մինչև տվյալ մոլեկուլի համար շեմային արժեքը:

Այստեղ ենթադրվում է, որ ամեն մի կլանված ֆոտոնի հետանքով մոլեկուլը քայքայվում է:

Քանի որ ֆոտոնային խտությունը կապված է ճառագայթման դաշտի էներգիայի

խտության հետ $U_{\lambda} (\text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \text{\AA}^{-1})$, ունենք՝

$$U_{\lambda} = h\nu n_{\lambda} = \frac{hc n_{\lambda}}{\lambda}, \quad (36)$$

և հետևաբար՝

$$\beta_{ph} = \frac{1}{h} \int U_{\lambda} \lambda \sigma_{ph} d\lambda. \quad (37)$$

Ֆոտոդիսոցիացիայի ժամանակը հավասար է

$$t_{ph} = \frac{1}{\beta_{ph}} = \frac{h}{\int U_{\lambda} \lambda \sigma_{ph} d\lambda} \quad (38)$$

Եվ այստեղ արդեն, բացի ճառագայթման դաշտի հատկություններից, անհրաժեշտ է նաև հաշվի առնել տվյալ պրոցեսի կտրվածքի փոփոխությունը ալիքի երկարության ֆունկցիայի տեսանկյունից: Ակնհայտ է, որ ամպի խորքերում՝ ճառագայթման կլանման ազդեցության պատճառով, ֆոտոդիսոցիացիայի ժամանակային սանդղակը մեծանում է՝ միջինում մոտ մեկ կարգով յուրաքանչյուր մեծության կլանման դեպքում:

3.3. Դիսոցիացիան բախումների հետևանքով

Մոլեկուլային ամպերի խորքային շրջաններում ճառագայթումը զգալիորեն կլանվում է, և մոլեկուլները հիմնականում պաշտպանված են ճառագայթային ազդեցությունից: Այս պայմաններում դիսոցիացիայի հիմնական մեխանիզմը դառնում են բախումները, մասնավորապես՝ հարվածային ալիքների առաջացրած մասնիկների արագությունների մեծացման արդյունքում: Այդ արագությունները կարող են հասնել մի քանի տասնյակ կմ/վ, իսկ որոշ դեպքերում՝ նույնիսկ գերազանցել 100 կմ/վ:

4. Ռեակցիաների կինետիկան

Միջաստղային միջավայրում ջերմադինամիկական գործընթացները, որպես կանոն, հեռու են հավասարակշռությունից: Քիմիական ռեակցիաների ընթացքը խիստ կախված է ջերմաստիճանից, խտությունից և մի շարք այլ ֆիզիկական գործոններից, որոնք ժամանակի և տարածության մեջ փոփոխական են: Հետևաբար, միջաստղային միջավայրում տեղի ունեցող ռեակցիաները պետք է դիտարկվեն անհատականորեն՝ հաշվի առնելով հնարավորինս մեծ թվով տարրական գործոններ, որոնք կարող են ազդել տվյալ երևույթի վրա:

4.1. Ռեակցիայի արագությունը

Դիտարկենք հետևյալ տիպի քիմիական ռեակցիան.



9)

Դիցուք σ -ն ռեակցիայի կտրվածքն է: Այդ դեպքում կարող ենք սահմանել ռեակցիայի հաստատունը, կամ k գործակիցը՝

$$k = \langle \sigma v \rangle, \quad ($$

40)

որտեղ v -ն փոխազդող հակազդականների (ռեազենտների) հարաբերական արագությունն է: Ենթադրելով, որ դրանց արագությունները ենթարկվում են Մաքսվելի բաշխմանը, ռեակցիայի արագության գործակիցը k պետք է կախված լինի գազի ջերմաստիճանից: Ռեակցիայի r արագությունը բնութագրում է հակազդականների և արդյունքների կոնցենտրացիաների փոփոխությունը ժամանակի ընթացքում:

$$r = -\frac{dn_A}{dt} = -\frac{dn_B}{dt} = \frac{dn_M}{dt} = \frac{dn_X}{dt}, \quad (41)$$

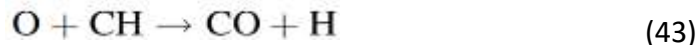
Ռեակցիայի արագությունը միշտ դրական է և համեմատական է ռեակցիայի արագության կոնստանտային:

$$r = kn_A n_B, \quad (42)$$

որտեղ n_A և n_B A, B հակազդականների կոնցենտրացիաներն են:

Չափելով σ -ն [cm^2], v -ն [cm/s], k -ն [cm^3/s] ստանում ենք, որ r -ը չափվում է [$cm^{-3}s^{-1}$].

Ռեակցիայի գործակիցները կարող են խիստ կախված լինել ջերմաստիճանից, մասնավորապես էներգետիկ ակտիվացման արգելքի առկայության դեպքում: Օրինակ, (15) ռեակցիայում, հաստատունը հավասար է $k \sim 10^{-9} cm^3/s$, մեկ մոլեկուլի հաշվով, որը համապատասխանում է $\sigma \sim 10^{-14} cm^2$ կտրվածքին միջաստղային ամպում: Այդ կարգի հաստատունները սովորական են մեծ թվով իոն-մոլեկուլային ռեակցիաների համար: Նեյտրալ-նեյտրալ ռեակցիայի դեպքում



ստանում ենք $k \sim 10^{-11} cm^3/s$ և $\sigma \sim 10^{-15} cm^2$ $T \sim 300 K$ դեպքում, այսինքն ավելի պակաս քան իոն-մոլեկուլային ռեակցիայի դեպքում:

Ռեակցիայի հաստատունի կախվածությունը ջերմաստիճանից հաճախ ներկայացնում են դասական Արենիուսի (Arrhenius equation) հավասարման ձևով

$$k(T) = Ae^{-E_a/kT}, \quad (44)$$

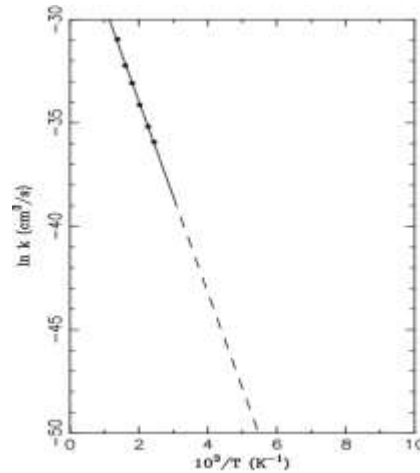
որտեղ E_a - ակտիվացիայի էներգիան է, և A -ն - Արենիուսի ֆակտորը (Arrhenius factor). Այստեղից,

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{kT}, \quad (45)$$

այսինքն, $\ln k$ -ի գրաֆիկը T^{-1} -ից ուղիղ գիծ է, որի թեքությունը E_a/k է և y առանցքը հատում է $\ln A$ -ում: Օրինակ, (26) ռեակցիան բերում է OH-ի առաջացմանը հետևյալ ռեակցիայի շնորհիվ



Հաստատունների լաբորատոր արժեքները տարբեր ջերմաստիճաններում բերված են նկ.1-ում:



Նկ.1 Ռեակցիաների հաստատունները տարբեր ջերմաստիճաններում:

Type of reaction	k ($\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$)
Ion-molecule reactions	10^{-9}
Neutral-neutral reactions	10^{-11}
Radiative association—diatomic	10^{-17}
Radiative association—polyatomic	10^{-9}
Radiative recombination	10^{-12}
Dissociative recombination	10^{-6}
Charge exchange reactions	10^{-9}

4.2 Պարունակության հաշվարկներ

Նման գնահատականներ կարելի է իրականացնել, եթե հայտնի են ռեակցիաները, որոնք առնչվում են տվյալ մոլեկուլին: Ենթադրենք, որ M մոլեկուլը հայտնվում է բացառապես համաձայն (39)-ի, որի հաստատունն է k_1 . Ենթադրենք նաև, այդ մոլեկուլը քայքայվում է ֆոտոդիսոցիացիայի միջոցով, որի արագությունն է $\beta_M \text{ s}^{-1}$, և



որի հաստատունն է k_2 : Այդ դեպքում, ժամանակի ընթացքում

$$\begin{aligned} \frac{dn_M}{dt} &= k_1 n_A n_B - n_M \beta_M - k_2 n_M n_C \\ &= k_1 n_A n_B - n_M [\beta_M + k_2 n_C]. \end{aligned} \quad (48)$$

Ստացիոնար վիճակում $dn_M/dt = 0$ և

$$n_M = \frac{k_1 n_A n_B}{\beta_M + k_2 n_C}, \quad (49)$$

որտեղ n_M ֆունկցիա է n_A, n_B, n_C -ից, ինչպես նաև k_1, k_2, β_M -ից: Անհրաժեշտ է իմանալ այդ մեծությունները և կազմել հավասարումներ, (39),(47) A,B,C նյութերի համար:

Այսպիսով, միջաստղային ամպերի քիմիան կարելի է դիտարկել միայն բոլոր առնչվող քիմիական ռեակցիաների, իրենց հաստատուններով տարբեր ջերմաստիճաններում, հայտնի լինելու դեպքում: Խնդիրը շատ է բարդ, հարյուրավոր հավասարումներ, ոչ միշտ ճշգրիտ հայտնի հաստատուններով պետք է լուծել, հաշվի առնելով հնարավոր անկայությունները:

5 Դիտումների արդյունքները

5.2 Դիֆուզ ամպեր

Դիֆուզ ամպերում կատարված դիտումների արդյունքները, օրինակ՝ Տ Օրի ուղղությամբ, ներկայացված են Նկ. 2-ում:

Atom-molecule	Abundance		
H	1.00	OH	9.2×10^{-8}
H ₂	0.79	CH ⁺	5.5×10^{-8}
O	5.6×10^{-4}	CH	4.8×10^{-8}
C ⁺	1.9×10^{-4}	C ₂	4.8×10^{-8}
N	9.5×10^{-5}	CN	5.0×10^{-9}
C	6.2×10^{-6}	CS	3.0×10^{-9}
CO	3.8×10^{-6}	NH	$<1.4 \times 10^{-8}$
HD	4.0×10^{-7}	H ₂ O	$<4.2 \times 10^{-9}$

Նկ.2: Միջին մոլեկուլային պարունակությունը դիֆուզ ամպերում

Ամպի ֆիզիկական պարամետրերն են՝

$T \sim 20-60 \text{ K}$, $n_H \sim 10^2-10^3 \text{ cm}^{-3}$:

Ամպում չեզոք ջրածնի միջին սյունյակային խտությունը կազմում է՝

$N_H \sim 5.2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$:

5.3 Խիտ մոլեկուլային ամպեր

Խիտ (մուր) ամպերում, ի տարբերություն դիֆուզ ամպերի, հիմնական բաղադրիչը մոլեկուլային ջրածինն է: Այստեղ փոշին կատարում է կրկնակի դեր՝ մոլեկուլային ջրածնի թե՛ պաշտպանման, թե՛ առաջացման գործընթացում:

Նախ, փոշու օպտիկական հաստությունն արդեն բավական մեծ է՝ միջաստղային ԳՄ ճառագայթման քայքայիչ ազդեցությունից պաշտպանելու համար: Երկրորդ, փոշու մակերևույթը ծառայում է որպես արդյունավետ միջավայր մոլեկուլների սինթեզի համար:

Նկ. 3-ում ներկայացված են Օրիոնի միգամածություն-ի վերաբերյալ դիտողական արդյունքները:

Molecule	Abu				
H ₂	1.0	CH ₃ OCH ₃	10 ⁻⁸	HC ₃ N	10 ⁻⁹
CO	10 ⁻⁴	CH ₃ CHO	10 ⁻⁸	HNC	10 ⁻⁹
H ₂ O	10 ⁻⁶	OCS	10 ⁻⁸	HCS ⁺	10 ⁻⁹
CH ₃ OH	10 ⁻⁶	CH ₃ C ₂ H	10 ⁻⁸	HC ₅ N	10 ⁻⁹
OH	10 ⁻⁷	SO	10 ⁻⁸	HC ₇ N	10 ⁻⁹
H ₂ CO	10 ⁻⁷	SO ₂	10 ⁻⁸	HC ₉ N	10 ⁻⁹
NH ₃	10 ⁻⁷	CS	10 ⁻⁸	C ₃ N	10 ⁻⁹
CN	10 ⁻⁸	HCO ⁺	10 ⁻⁸	CH ₃ C ₃ N	10 ⁻⁹
C ₂ H	10 ⁻⁸	H ₂ S	10 ⁻⁸	CH ₃ CHCN	10 ⁻¹⁰
HCN	10 ⁻⁸	H ₂ CS	10 ⁻⁹	HNCO	10 ⁻¹⁰
		CH ₃ CN	10 ⁻⁹	PN	10 ⁻¹⁰
				HC ₁₁ N	10 ⁻¹⁰

Նկ. 3. Խիտ ամպերում միջին մոլեկուլային պարունակությունը. Օրինի միգամածություն:

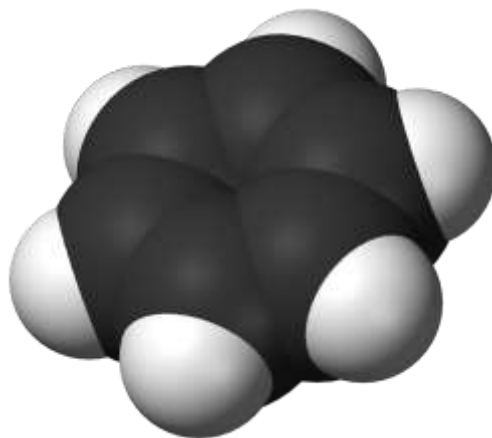
6. Միջաստղային պոլիցիկլիկ արոմատիկ ածխաջրածիններ (ՊԱԱ, PAH)

Վաղ ենթակարմիր դիտումները, սկսած IRAS առաքելությունից, արդեն հուշում էին արոմատիկ միացությունների առկայության մասին:

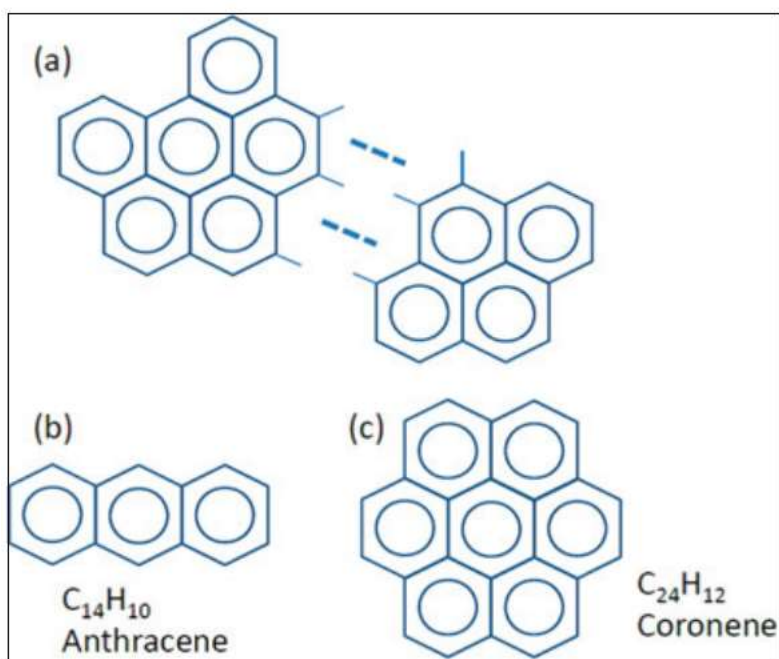
Կառուցվածքը: ՊԱԱ մոլեկուլները հարթ կառուցվածք ունեցող արոմատիկ միացություններ են: Դրանց հիմքում ընկած են վեց ածխածնի ատոմներից կազմված վեցանկյուն օղակներ, որոնց եզրերին միացած են ջրածնի ատոմներ: Որպես օրինակ կարելի է բերել բենզոլի մոլեկուլը (C₆H₆), որը հանդիսանում է արոմատիկ միացությունների հիմնարար կառուցվածքային տարր:

Միջաստղային ՊԱԱ մոլեկուլները սովորաբար պարունակում են 50 և ավելի ածխածնի ատոմներ, որոնք միացած են ջրածնի ատոմների հետ՝ պայմանավորված մոլեկուլների ոչ հազեցված կառուցվածքով:

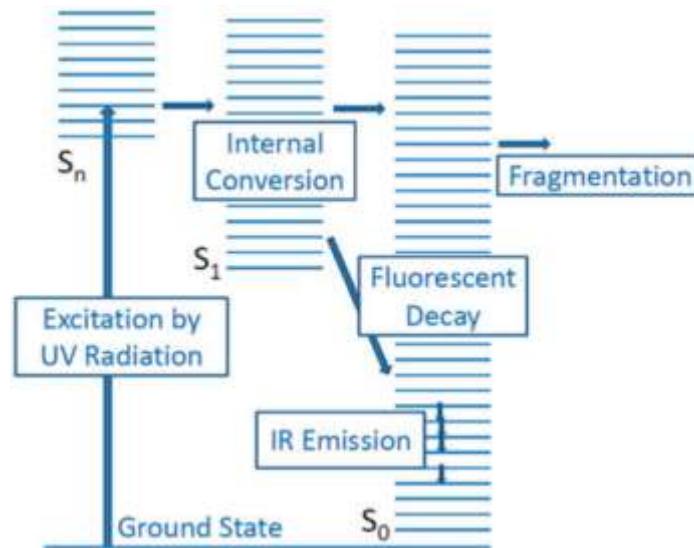
Նման մեծ մոլեկուլները կամ փոշու շատ փոքր հատիկները կարող են ենթարկվել կարճատև տաքացման՝ էներգետիկ (տեսանելի կամ ԳՄ) ֆոտոնի կլանումից հետո: Իսկ ավելի մեծ փոշու հատիկները չեն կարող արդյունավետորեն ճառագայթել՝ իրենց ցածր ջերմաստիճանի պատճառով:



Նկ.4: Բենզոլի C_6H_6 մոլեկուլը:

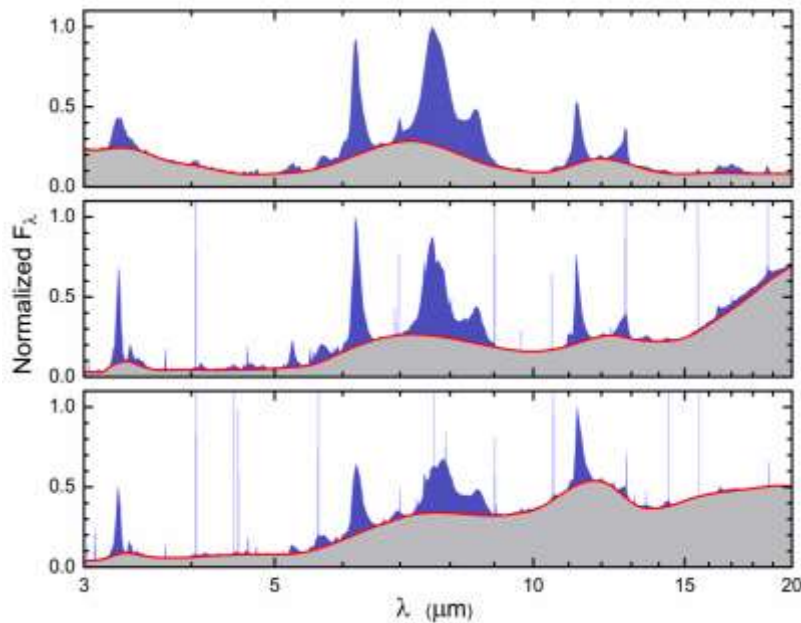


Նկ. 4: Պոլիցիկլիկ արոմատիկ ածխաջրածինների տարբեր տեսակներ



Նկ. 5. ՊԱԱ մոլեկուլի ԵԿ (ենթակարմիր) ճառագայթման սխեման՝ ԳՄ ֆոտոնի կլանումից հետո:

ՊԱԱ-ների ենթակարմիր ճառագայթման ամենակարևոր շերտերը գտնվում են 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 և 11.2 μm ալիքների երկարությունների վրա:



Նկ. 6. ՊԱԱ մոլեկուլի ճառագայթման առավել արտահայտված շերտերը:

Դրանք երևում են Նկ. 6-ի սխեմայից, իսկ դիտողական սպեկտրը ներկայացված է Նկ. 7-ում:

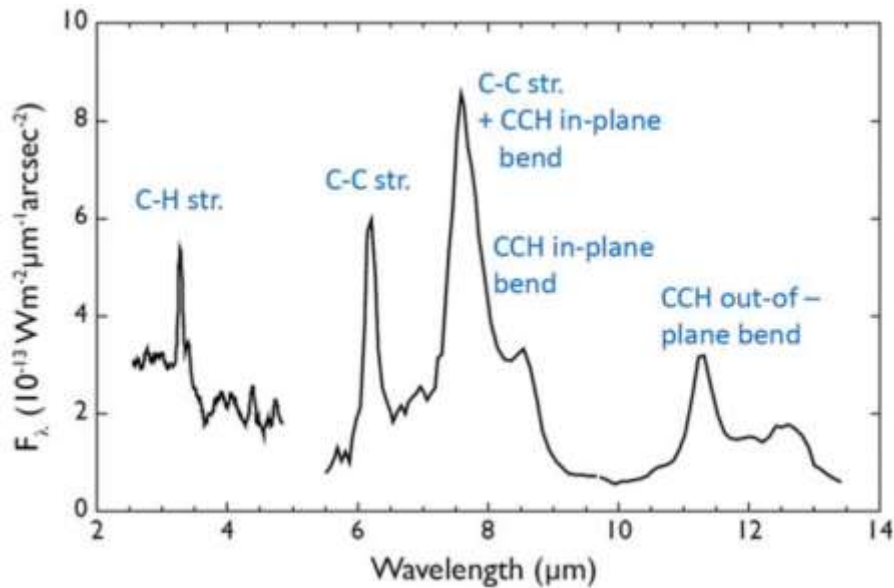
ՊԱԱ մոլեկուլների կառուցվածքի որոշ առանձնահատկություններ ներկայացված են Աղյուսակում:

Աղյուսակ.

N_C — ածխածնի ատոմների քանակը մոլեկուլում,

f_C — ածխածնի հարաբերական պարունակությունը (թրոմ` միլիոներորդ մասերով):

Carrier	Component	N_C	Size (nm)	f_C (ppm)
PAHs	MIR features	20–100	0.4–1	14
PAH clusters	MIR plateaus	100–1000	1–2	8
Small grains	MIR continuum	10^3 – 10^6	2–10	25
Larger grains	FIR continuum	$>10^6$	>10	≥ 35



Նկ. 7. Գալակտիկ հարթությունում դիտված ԵԿ (ենթակարմիր) սպեկտրը (AKARI , Onaka, T. և Sakon, I.)

($l = 312^\circ$, $b = 0.5^\circ$): Ցույց են տրված տատանողական սպեկտրի քիմիական կապերի տատանման հիմնական շերտերը:

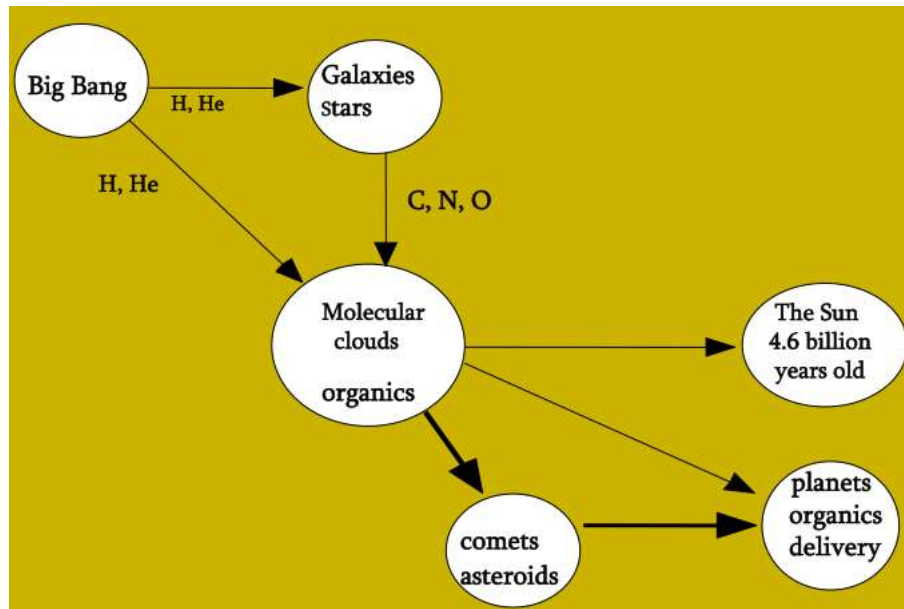
6 Աստղակենսաբանության տարրեր

Բացի Երկրից, այսօր՝ 2025 թ. դրությամբ, աստղագիտությանը հայտնի չեն կյանքի գոյության հաստատված դեպքեր այլ մոլորակների վրա, այդ թվում՝ արտաբեզակնային մոլորակներում: Սակայն դիտումներից արդեն բավականին տեղեկություն կա այն մասին, թե ինչպես կարող էին ձևավորվել և զարգանալ նախակենսաբանական մոլեկուլները՝ ընդհուպ մինչև կյանքի առաջացումը Երկրի վրա:

Մեր մոտեցումն ավելի հասկանալի դարձնելու համար համառոտ նկարագրենք նման տիպի մոլեկուլների առաջացումը և էվոլյուցիան Տիեզերքում: Բնականաբար, նախ ներկայացնենք ժամանակակից

աստղաֆիզիկայի պատկերացումը Տիեզերքի ծագման և զարգացման մասին:

Ժամանակակից տվյալների համաձայն՝ Տիեզերքը առաջացել է մոտ 13.8 միլիարդ տարի առաջ:



Սկիզբը՝ «0 պահը», դիտարկվում է որպես ֆազային անցում անհայտ նախնական վիճակից դեպի այն վիճակը, որը բնորոշ է այսօրվա Տիեզերքին: Նրա բաղադրության մասին ներկայումս հայտնի է, որ սովորական (բարիոնային) նյութը կազմում է մոտ 4.9%, մութ նյութը՝ մոտ 26.8% (անտեսանելի, սակայն ձգողական փոխազդեցության միջոցով հայտնաբերված), իսկ շուրջ 68.3%-ը կազմում է այսպես կոչված մութ էներգիան, որի գոյությունը բխում է Տիեզերքի արագացմամբ ընդարձակման դիտողական փաստից:

Սկզբնական փուլում քիմիական տարրերից առկա էին հիմնականում ջրածինը և մոտ տասն անգամ ավելի փոքր քանակությամբ հելիումը: Ածխածինը, թթվածինը, ազոտը և ավելի ծանր տարրերը սինթեզվել են ավելի ուշ՝ աստղերի կենտրոններում ընթացող ջերմամիջուկային ռեակցիաների արդյունքում: Այդ գործընթացների շնորհիվ ձևավորվել է տարրերի ամբողջ բազմազանությունը՝ մինչև պարբերական աղյուսակի ծանր տարրերը:

Դիտողական տվյալների համաձայն՝ C, N, O եռյակի պարունակությունը մոտավորապես 10 000 անգամ փոքր է ջրածնի պարունակությունից, իսկ

երկաթի խմբի տարրերը (և կյանքի համար կարևոր որոշ տարրեր, օրինակ՝ ֆոսֆորը)՝ մոտ 100 000 անգամ պակաս:

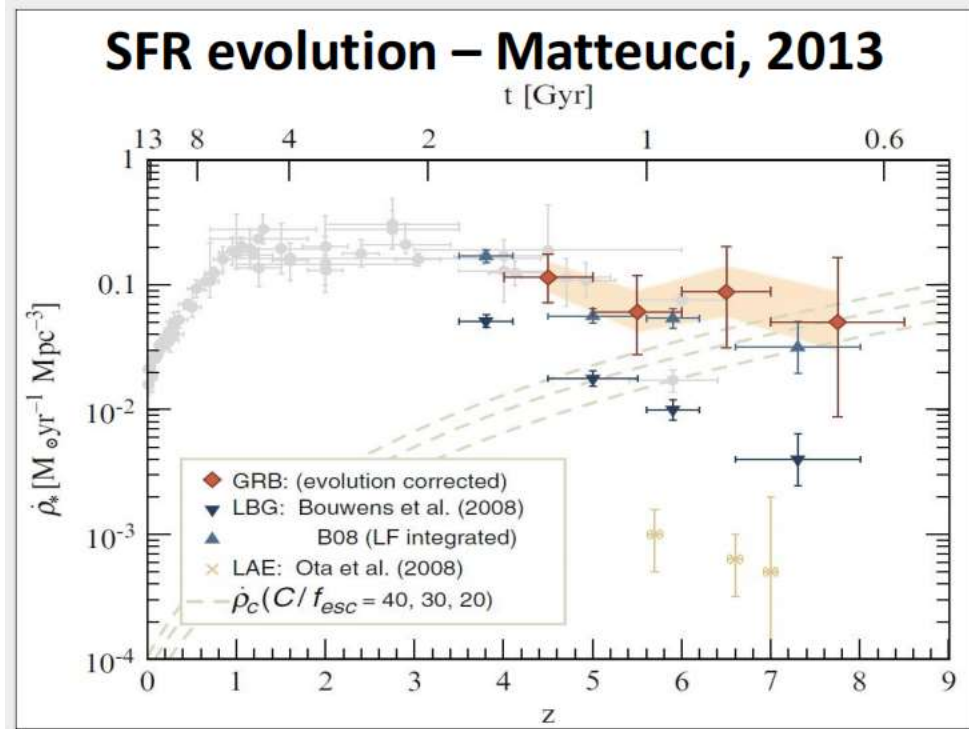
Գերնոր աստղերի պայթյունների (8 արեգակնային զանգվածից ավելի զանգված ունեցող աստղերի կյանքի անխուսափելի ավարտը) և ավելի փոքր զանգված ունեցող աստղերի նյութի արտահոսքերի շնորհիվ միջաստղային միջավայրը հարստանում է կյանքի համար անհրաժեշտ ծանր տարրերով:

Նոսր միջաստղային նյութը ժամանակի ընթացքում խտանում է ամպերի տեսքով, որոնց ամենախիտ շրջաններում՝ այսպես կոչված աստղագոյացման շրջաններում, առաջանում են նոր աստղեր:

Այստեղ կարևոր է նշել հետևյալ դիտողական փաստը. 7–5 միլիարդ տարի առաջ ընկած ժամանակահատվածը չափազանց հետաքրքիր է կյանքի առաջացման տեսանկյունից:

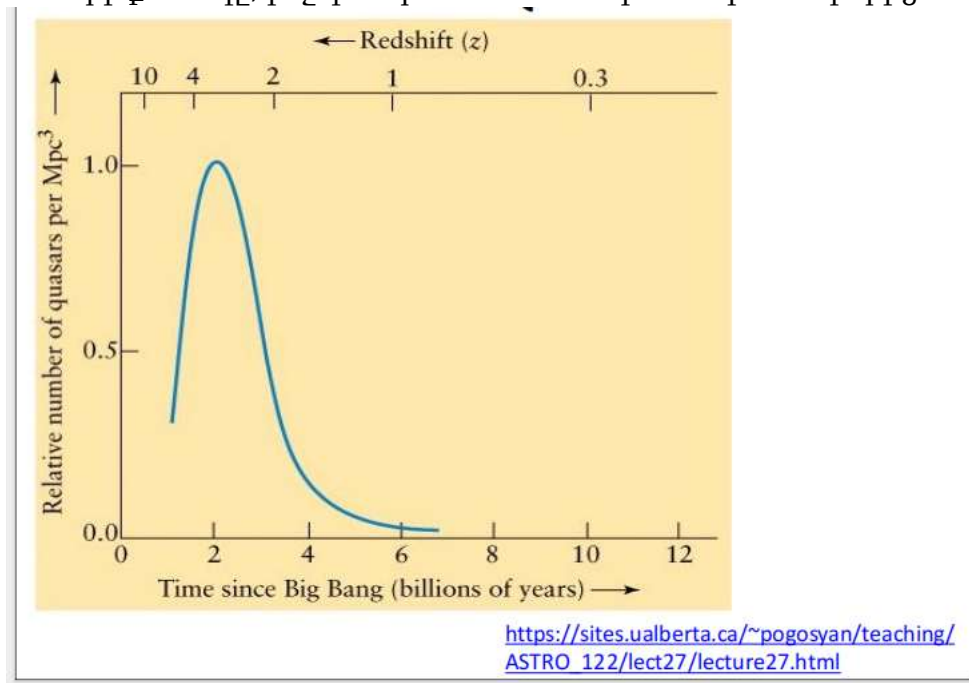
Վերը նշված փաստերը մենք ամփոփել ենք ստորև ներկայացված աղյուսակում .

- **Տիեզերքում բուռն երևույթների մարում** — 7–5 միլիարդ տարի առաջ
- **Աստղագոյացման արագության նվազում** — 7–5 միլիարդ տարի առաջ
- **Հաստ և բարակ գալակտիկական սկավառակների ենթասկավառակների տարանջատում** — 7–5 միլիարդ տարի առաջ
- **Փոշու ինտենսիվ առաջացում** — սիլիկատային փոշի (գերնոր աստղեր) և գրաֆիտային (ածխածնային) փոշու գերակայություն (AGB աստղեր) — 7–5 միլիարդ տարի առաջ
- **Գալակտիկայի սկավառակում արագությունների դիսպերսիայի աճ** (աստղերի և ամպերի բախումների հաճախականության մեծացում) — 7–5 միլիարդ տարի առաջ
- **Թաքնված (մութ) նյութի խտացումների ներդրում** — դեռևս լիովին պարզաբանված չէ



Նկ. Աստղագոյացման տեմպի նվազումը վերջին 5–7 միլիարդ տարվա ընթացքում:

Մեծ Պայթյունից հետո անցած ժամանակահատվածում նվազել է նաև քվազարների քանակը, ինչպես երևում է համապատասխան նկարից:



Նկ. Ժամանակի ընթացքում միավոր ծավալում քվադրանտների թվի նվազումը:

Երկրի վրա կյանքի վերաբերյալ ժամանակակից գիտությանը հայտնի են հետևյալ հիմնական ժամանակագրական տվյալները.

- **Արեգակ** — 4.6 ± 0.1 միլիարդ տարի առաջ
- **Երկիր** — 4.54 ± 0.05 միլիարդ տարի առաջ
- Երկրի հետ գիսավորների բախումների փուլի ավարտ — 3.8 միլիարդ տարի առաջ
(դրանք նպաստել են մթնոլորտի և օվկիանոսների ձևավորմանը)
- Երկրի ամենահին նստվածքային ապարներ — 3.8 միլիարդ տարի առաջ
- Կյանքի առաջին հետքեր Երկրի վրա — 3.8 միլիարդ տարի առաջ
- Առաջին կապտականաչ ջրիմուռներ (ցիանոբակտերիաներ) — 2.7 միլիարդ տարի առաջ
- Մթնոլորտային թթվածնի զգալի աճ ($>1\%$) — 2.4 միլիարդ տարի առաջ

Այսպիսով, Արեգակը ձևավորվել է մոտ 4.6 միլիարդ տարի առաջ՝ իր մոլորակային համակարգով, ներառյալ Երկիրը (մոտ 4.5 միլիարդ տարի առաջ): Հսկա մոլորակների շրջակայքում ձևավորվել են գիսավորների և աստերոիդների մեծ մասը, որոնք հետագայում, մոլորակների ձգողական ազդեցության հետևանքով, շեղվել են իրենց սկզբնական ուղեծրերից՝ շարժվելով թե՛ դեպի արտաքին, թե՛ դեպի ներքին շրջաններ, ներառյալ ներքին մոլորակները:

Այս գործընթացը տևել է մոտ 0.5 միլիարդ տարի: Երկրի դեպքում հայտնի է, որ «ծանր ուժահարումը» (Late Heavy Bombardment) ավարտվել է մոտ 3.8 միլիարդ տարի առաջ:

Արդեն հայտնի է, որ՝

1. Երկրի վրա կյանքի առաջացմանը նախորդել է նյութի քիմիական զարգացման փուլ՝ Երկրից դուրս:
2. Կյանքը ներկայացնող ինքնավերարտադրող համակարգերի ժառանգականությունն իրականացվում է «գենետիկ» կոդի միջոցով:
3. Կենդանի օրգանիզմների սպիտակուցներում առկա ամինաթթուները ցուցաբերում են մոլեկուլային անհամաչափություն (քիրալություն), այսինքն՝ սպիտակուցները կազմված են միայն «ձախ» ամինաթթուներից:
4. Երկրի պայմաններում նման խիրալ անհամաչափության ինքնաբեր առաջացումը քիչ հավանական է. ենթադրվում է, որ այդ ամինաթթուները կարող էին առաջանալ Երկրից դուրս:

Ստորև ներկայացված են նախակենսաբանական մոլեկուլների առաջացման համար անհրաժեշտ հինգ հիմնական քայլերը.

1. **Պարզ մոլեկուլների առաջացում** — օրինակ՝ մոլեկուլային ջրածնի (H_2) սինթեզ:
2. **Փոշու հատիկների և դրանց սառցե թաղանթների ձևավորում** — հատիկների չափերը կազմում են մոտ $0.01-0.3 \mu m$:
3. **Մոլեկուլների բարդացում** — ավելի բարդ օրգանական միացությունների առաջացում:
4. **Նախաբջջային կառուցվածքների առաջացում** — թաղանթների միջոցով մեկուսացված համակարգերի ձևավորում:
5. **Քիրալացում** — կենսաբանական համակարգերում ամինաթթուների «ձախ» ընտրողականություն:

Քայլ 1. Մոլեկուլների առաջացում

Կյանքի առաջացման առաջին և ակնհայտ քայլը մոլեկուլների սինթեզն է՝ սկսած ամենապարզից՝ մոլեկուլային ջրածնից (H_2):

Համեմատենք երկու ժամանակային գործընթացներ՝ մոլեկուլի առաջացումը և քայքայումը: Մոլեկուլների առաջացումը տեղի է ունենում փոշու հատիկների մակերևույթների վրա՝ մոլեկուլային ամպերի այն շրջաններում, որոնք պաշտպանված են ԳՄ ճառագայթումից:

Այդ գործընթացի ժամանակային գնահատականը հետևյալն է՝

$$t(H_2)(\text{առաջացում}) = \frac{1.5 \cdot 10^9}{n} \text{ yr},$$

Եթե միջաստղային մոլեկուլային ամպի խտությունը $n \geq 10^6 \text{ cm}^{-3}$ է, ապա

$$t(H_2) < 1500 \text{ տարի}$$

Մոտավորապես այդքան ժամանակ էլ ծախսվում է H_2 մոլեկուլների քայքայման համար այն տարածքներում, որոնք պաշտպանված չեն UV (գերմանուշակագույն) ճառագայթումից: Քայքայման ժամանակը գնահատվում է հետևյալ կերպ.

$$t(H_2) \text{ (քայքայում)} = \frac{1}{k(UV)} = \frac{1}{10^{-11} - 10^{-9}} \text{ վրկ} \approx 33 - 3300 \text{ տարի}$$

Քայլ 2. Փոշի

Փոշին խիստ անհրաժեշտ է մոլեկուլային միջաստղային միջավայրում, հատկապես որպես հիմք հետագա բարդացման համար: Սկզբնական շրջանում՝ ծանր տարրերի պակասի պատճառով, փոշի դեռ չէր գոյություն ունեցել, և մոլեկուլները (այդ թվում H_2) առաջանում էին գազային փուլում, որը շատ արդյունավետ չէր:

Մենք կյանքի առաջացումը կապում ենք վերջին 6–7 միլիարդ տարիների հետ, երբ արդեն փոշին առկա էր ժամանակակից չափերով: Փոշին ձևավորվում է՝

- Գերնոր աստղերի մնացորդներում (հիմնականում սիլիկատներ՝ SiO և նման օքսիդներ)
- Կարմիր հսկաների և AGB տիպի աստղերի սառը աստղային քամիներում (հիմնականում գրաֆիտ)

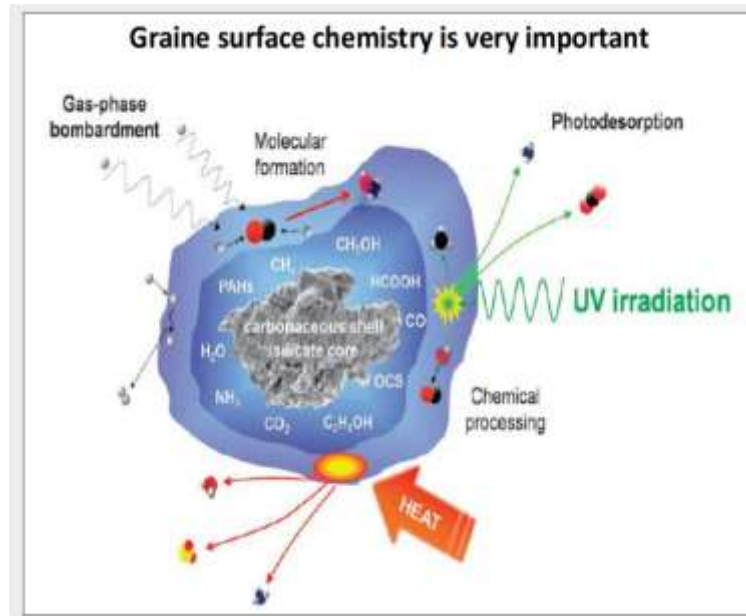
Այս շրջաններում հազեցած գոլորշիների ճնշումը բավական էր, որպեսզի փոշի առաջանա գազային ֆազայից կոնդենսացիայի միջոցով:

Սկզբում ձևավորվում են հատիկների կորիզներ՝ մոտ $0.01 \mu m$ չափով, որոնց վրա բարենպաստ պայմաններում կարող է ձևավորվել սառցե թաղանթ՝ մինչև $\sim 0.1 \mu m$ հաստությամբ: Սառցե թաղանթներն ամենատարածված մոլեկուլների կոնդենսատներն են, ինչպիսիք են՝ H_2O , CO , CO_2 , CH_4 , NH_3 , HAC , CH_3OH և այլն:

Սառցե թաղանթների աճի համար անհրաժեշտ ժամանակը գնահատվում է՝

$$t = \frac{3.0 \cdot 10^9}{n} \text{ տարի}$$

Եթե $n \geq 10^6 \text{ cm}^{-3}$, ապա $t < 3000$ տարի ($T = 10\text{--}20 \text{ K}$):



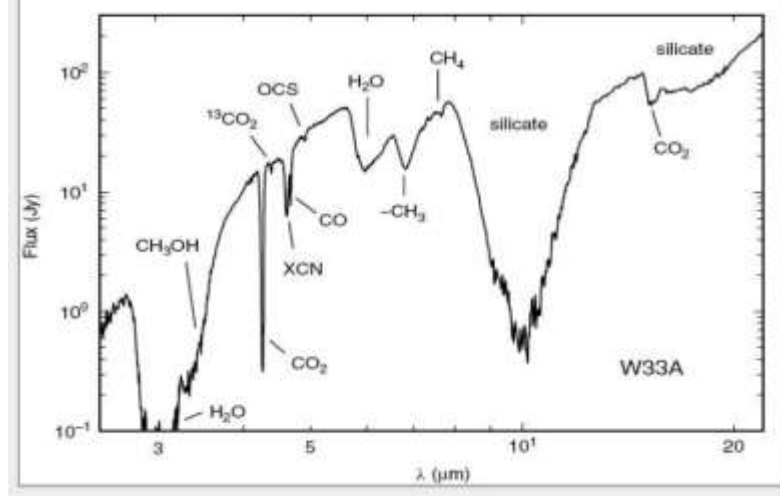
Նկ. Փոշու հատիկի կորիզը և սառցե թաղանթի սխեման:

Պետք է շեշտել, որ սառույցները դիտվում են աստղաառաջացման շրջաններում, ինչպես երևում է համապատասխան նկարից:

Քայլ 3. Մոլեկուլային բարդացումը

Մոլեկուլային բարդացումը, այսինքն՝ ավելի բարդ օրգանական միացությունների սինթեզը, առավել արդյունավետ է պինդ ֆազայում, ի տարբերություն գազային ֆազայի, որն պահանջում է բարձր ջերմաստիճաններ և ճնշումներ, ինչը հակասում է 5-րդ քայլին՝ կյանքի մեջ քիրալության (քիրալացման) ձևավորմանը:

Սառույցները լայնորեն դիտվում են



Պինդ ֆազայում հնարավոր է ներկայացնել օրինակ անհրաժեշտ քիմիական ռեակցիաների, որոնք ընթանում են մոլեկուլային ամպերին բնորոշ ցածր ջերմաստիճաններում:

Խոսքը վերաբերում է սառույցներում ճառագայթային քիմիական պոլիմերիզացիայի հնարավորությանը, որը փորձով ստուգված է երկու դեպքում էլ.

1. Էլեկտրամագնիսական ճառագայթահարման միջոցով՝ 6–13.6 eV էներգիայով ֆոտոններով
2. Գերբարձր էներգետիկ մասնիկների միջոցով՝ 1 MeV–1 GeV պրոտոններ և α -մասնիկներ

Հետաքրքիր է, որ մոլեկուլային ամպերի դեպքում տիեզերական մասնիկները նշված էներգետիկական դիապազոնում պետք է դիտարկել որպես առաջնային: Դա պայմանավորված է նրանով, որ նաև **SU** (Տիեզերական միջավայր) ջրածնի հետ փոխազդեցությունն է պատասխանատու 6–13.6 eV գերմանուշակագույն (UV) ֆոտոնների ճառագայթման համար, և, իհարկե, ճառագայթահարման ազդեցությունն էլ հենց մյուս կողմից է ազդում:

Հայտնի գնահատականները ցույց են տալիս, որ դա հնարավոր է նման պայմաններում՝ և ճառագայթման առկայության, և սառույցների գոյության տեսանկյունից:

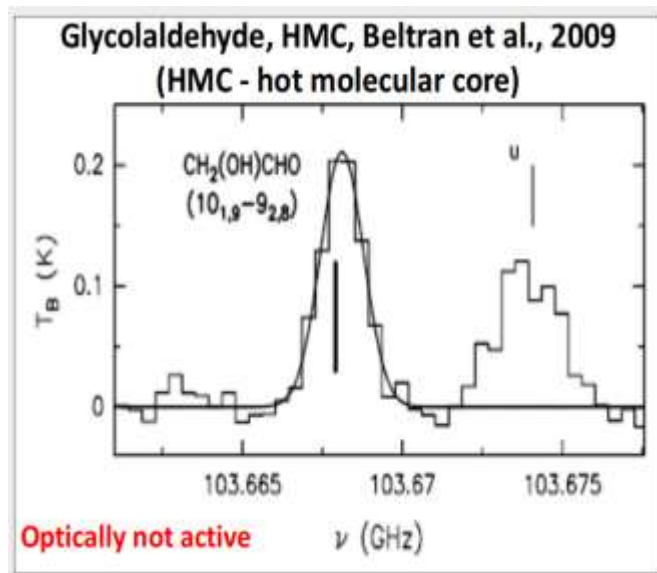
Վերադառնալով վերոհիշյալ վճռական գիտափորձներին, որոնք հաստատեցին մոլեկուլային բարդացումը միջաստղային ամպերի պայմաններում, նշենք, որ

մինչև 2025թ. սկսնակ՝ կատարվել է մեծ թվով փորձեր: Այստեղ հղում ենք անում միայն երկու աշխատանքների հրապարակումների վրա՝

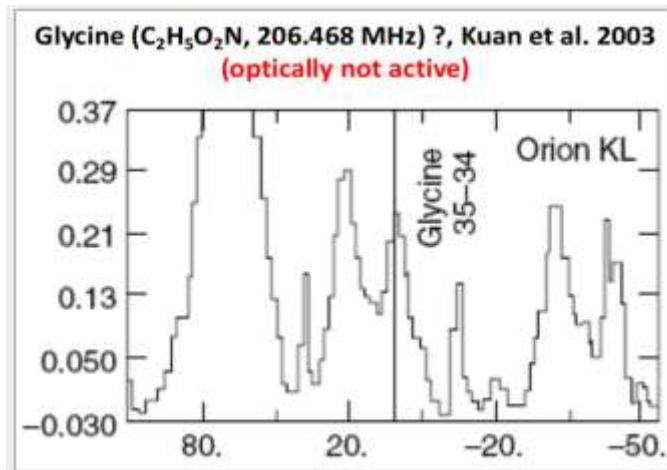
- Kaiser, Roesler, 1990–2000
- Dworkin et al., 2004

Ճառագայթվել են 5–10 K ջերմաստիճանի մաքուր սառույցներ և դրանց խառնուրդներ, ինչպիսիք են՝ H_2O , CO , CO_2 , NH_3 , CH_4 , CH_3OH , որոնք առավել առատ են միջաստղային ամպերում:

Ճառագայթման աղբյուրները տարբեր արագացուցիչներ էին, որտեղ արագացված (հիմնականում 5–10 MeV) մասնիկների (պրոտոններ, α -մասնիկներ, էլեկտրոններ) փունջը կիրառվել է վերոհիշյալ սառույցների վրա: Գիտափորձերի վաղ փուլում օգտագործվել է նաև ^{60}Co (γ -գուն, գամմա-թնդանոտ): Գերմանուշակագույն (UV) ճառագայթման դեպքում կիրառվել են տարբեր ջրածնային լամպեր (10–12 eV էներգիա): Արդյունքում գրանցվել են ամինաթթուներ, ծանր ածխաջրածիններ և այլ օրգանական նյութեր:



Նկ. Պարզագույն շաքարների ներկայացուցիչ, որը հայտնաբերվել է աստղաառաջացման տարածքներում:



Նկ. Գլիցին-ի հավանական նույնացումը Օրիոնի մոլեկուլային ամպում

Բացի միջաստղային ամպերից, բարդ մոլեկուլները հայտնաբերվել են նաև երկնաքարերում, որոնք ընկել են Երկրի վրա նրա առաջացման ժամանակից սկսած: Ինչպես արդեն շեշտվել է, երկնաքարերի հոսքը ուժգին էր առաջին կես միլիարդ տարիների ընթացքում, մինչև մոտ 3.8 մլրդ տարի առաջ, ապա գրեթե դադարեց, և այժմ միայն էպիզոդիկ դեպքերով հասնում է Երկրի մակերեսին:

Երկնաքարերի կազմի վերլուծությունը (ոչ բոլորն, այսպես կոչված ածխային տիպի) ցույց է տվել հետևյալ տարրերը, որոնք ներկայացված են աղյուսակում:

Carbon containing species in meteorites – aa with ee !		
Compound class		Concentration (ppm)
Amino acids/CM meteorites	Optically active	17–60
Amino acids/CI meteorites		~5 ^a
Aliphatic hydrocarbons		>35
Aromatic hydrocarbons		3319 ^b
Fullerenes		>100 ^c
Carboxylic acids		>300
Hydrocarboxylic acids		15
Dicarboxylic acids and Hydroxydicarboxylic acids		14
Purines and Pyrimidines		1.3
Basic N-heterocycles		7
Amines		8
Amides linear		>70
Amides cyclic		>2 ^d
Alcohols		11
Aldehydes and Ketones		27
Sulphonic acids		68
Phosphonic acids		2

Ինչպես տեսնում ենք, ամինաթթուներ, տարբեր ածխաջրածիններ և այլ բարդ մոլեկուլներ առկա են այդ գոյացումներում, և, որ կարևոր է, դրանք

օպտիկապես ակտիվ են: Դա աղտոտվածությունն չէ, քանի որ կոնցենտրացիան չի նվազում մակերեսից դեպի նմուշի խորքը:

Մինչև հաջորդ քայլին անցնելը, կարճ քննարկենք օրգանական նյութի շրջանառության հնարավորությունները Գալակտիկայում՝ համաձայն **Kwok (2000)**:

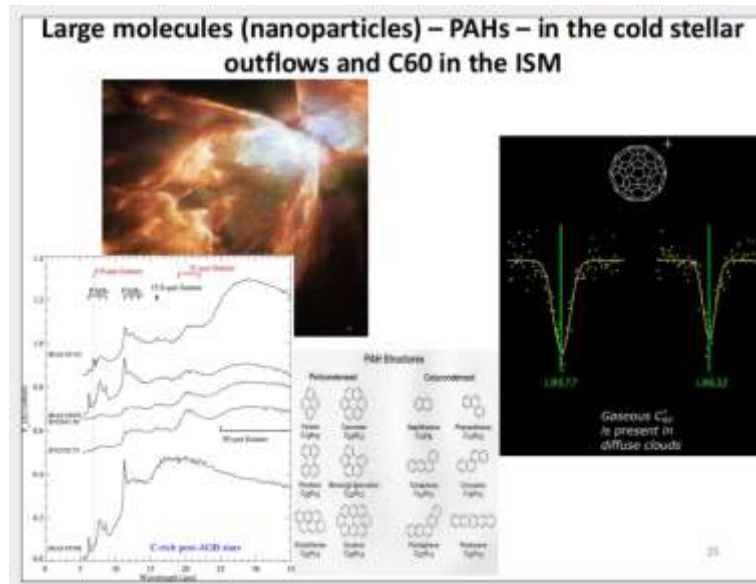


Նկ. Օրգանիկ նյութի շրջանառությունը գալակտիկայում

Դիֆուզ միջաստղային ամպերը գալակտիկայի հարթությունում փոխակերպվում են մոլեկուլային ամպերի՝ այսպես կոչվող գրավիտացիոն պոտենցիալի «հորերում», որտեղ միջաստղային նյութը կարող է խտանալ:

Օրգանական միացությունները առաջանում են մոլեկուլային ամպերում՝ առավել արդյունավետ կերպով փոշու հատիկների մակերևույթին, և ենթարկվում են հետագա բարդացման: Աստղաառաջացման շրջաններում այդ նյութը հասնում է իր առավելագույն բարդության՝ ձեռք բերելով այսպես կոչվող քիրալության հատկություն, որը մանրամասն կքննարկենք հաջորդ քայլին:

Ներքևի նկարում բերված են բարդ մոլեկուլների գրանցման օրինակներ՝ մասնավորապես ՊԱԱ-ների առկայությունը սառը աստղային քամիներում և C_{60} ֆուլերենը դիֆուզ ամպերում:

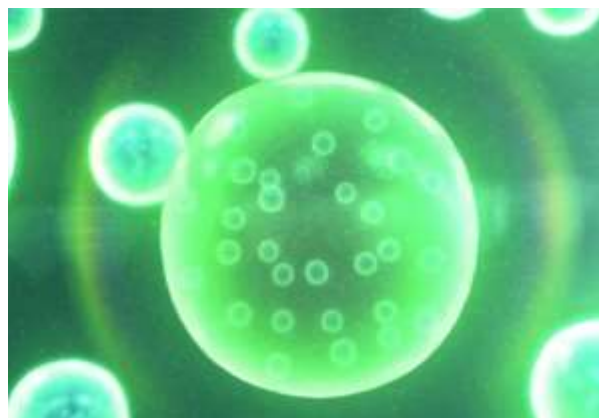


Նկ. Պոլիցիկլիկ արոմատիկ ածխաջրածինների (ՊԱԱ) և ֆուլերենի գրանցման օրինակներ

Քայլ 4. «Մեկուսացում» շրջապատից

Լաբորատոր պայմաններում ակտիվորեն շարունակվում են հետազոտությունները նախաբջիջների կազմավորման վերաբերյալ՝ քիմիապես ակտիվ, այսպես կոչվող «դրոփլետ-կաթիլիկների» միջոցով (Նկ.):

Դրանք դեռևս չեն համարվում իրական նախաբջիջներ, քանի որ ինքնուրույն չեն կարող տրոհվել (բաժանվել): Մակայն բազմաթիվ հատկություններով դրանք մոտ են նախաբջիջներին, և համապատասխան գիտափորձերը շարունակվում են:



Նկ. Քիմիապես ակտիվ «կաթիլիկներ»՝ որպես նորաստեղծ Երկրի նախաբջիջի մոդել

(Zwicker et.al.,2017; Haldane, 1955; Oparin, 1924).

Հետաքրքիր է, որ այս մոդելի հիմքում երևում է «membrane first» («թաղանթը սկզբից») հիպոթեզը, որը ընդգծում է շրջապատից մեկուսանալու անհրաժեշտությունը նախաբջջի հայտնվելու գործընթացում (**Deamer, 1980**):

Պետք է շեշտել, որ նման հատկություններով, մասնավորապես երկշերտ թաղանթով՝ ջուրը ձգող կողմով մեկ, և վանող՝ հակառակ կողմից, նյութերը վաղուց արդեն հայտնի են: Այս համակարգերը հիմնված են լիպիդների, ֆոսֆոլիպիդների և նման նյութերի վրա, որոնց կարևորությունը վաղուց արդեն նշել են **McCarthy & Calvin, 1967**, հատկապես ընդգծելով պոլիիզոպրենային ածխաջրածինների դերը:

Ավելացնենք մեր կողմից, որ նման թաղանթները կարող են սինթեզվել մեթանի սառույցում վերոհիշյալ ճառագայթահարման փորձերում, և մնում է միայն էքսպերիմենտալ ապացույցի պահանջը:

Քայլ 5. Քիրալացում (Chiralization)

Բարդ մոլեկուլային օրգանական միացությունները հաճախ պարունակում են այսպես կոչված **ոչ համաչափ ածխածնի ատոմ**, որի հետևանքով մոլեկուլի տարածական կառուցվածքը համարժեք չէ իր հայելիային պատճենին:

Նույն պատճառով տվյալ մոլեկուլի ջրային լուծույթը ենթարկվում է բևեռացվածության հարթության պտույտի՝ ձախից աջ կամ աջից ձախ: Օրինակ, ձախ ուղղված մոլեկուլներն են **ձախ ամինաթթուները**, իսկ աջ ուղղվածը՝ **աջ շաքարները**: Քիրալությունը հանդիսանում է կյանքի հիմնարար հատկանիշ. դրանով կենդանի օրգանիզմները տարբերվում են ոչ կենդանիներից: Օրինակ, բոլոր կենդանիների սպիտակուցները կազմված են **ձախ ամինաթթուներից**:

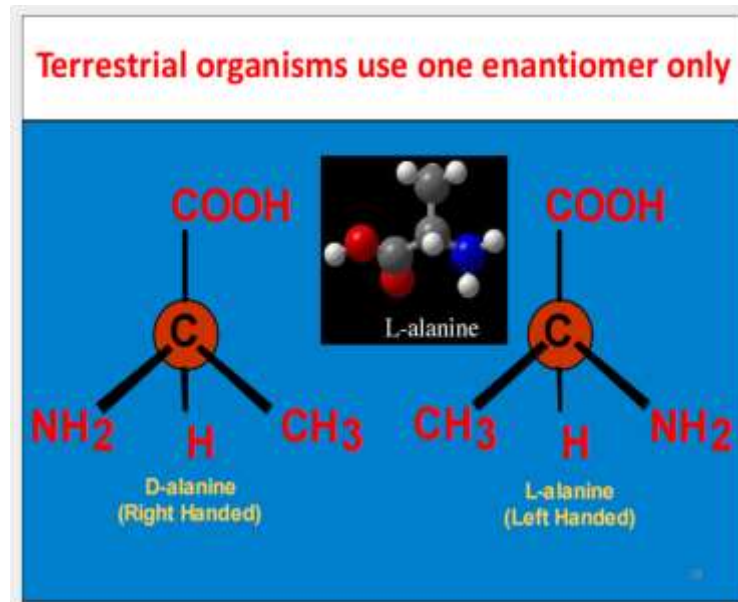
Այս առումով, խիրալ մոլեկուլները կարևոր նախադրյալ մոլեկուլներ են առաջին կենդանի օրգանիզմների համար: Նույն տրամաբանությամբ, գենետիկ կոդի էությունը, որը պատասխանատու է ժառանգականության համար, հիմնված է մոլեկուլների խիրալության վրա:

Քիրալ մոլեկուլները կարող են առաջանալ և զարգանալ գիսավորների և երկնաքարերի հիմքը կազմող նյութերի պայմաններում:

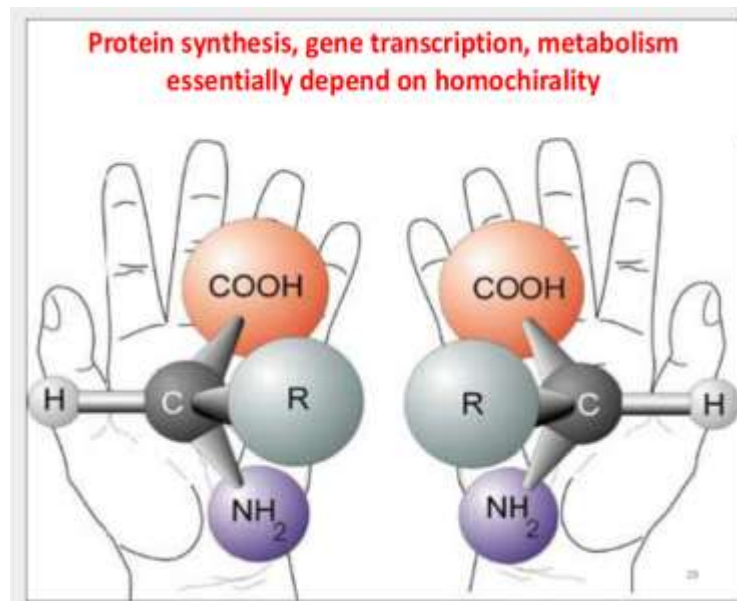
Մոլեկուլային ամպերի պայմաններում, խիրալ մոլեկուլների առաջացման արդյունավետ մեխանիզմ կարող է լինել **սելեկտիվ ֆոտոքիմիան**, այսինքն՝ 6–

13.6 eV էներգիայի շրջանային բևեռացված լույսի (CPL – Circularly Polarized Light) միջոցով վերոհիշյալ սառույցների ճառագայթահարման գործընթացը:

Նման գիտափորձ արդեն իրականացվել է, և ստացված ամինաթթուները խիրալ բնույթ էին ունեցել (**Nuevo et al., 2006**):



Նկ. Երկրի կենդանիների սպիտակուցները պարունակում են միայն մեկ, որոշա կի տիպի քիրալ մոլեկուլներ:



Նկ. Նույն մոլեկուլները, որտեղ մեկը մյուսի հայելային պատկերն է

Հարկ է շեշտել, որ **Միլերի (Miller–Urey) փորձերը**, որոնք բերված են բոլոր կենսաբանության դասագրքերում, ցույց են տալիս հետևյալը. հավանաբար մեթանի, ամոնիակի, ջրի և ջրածնի խառնուրդը՝ էներգիայի աղբյուրի ազդեցությամբ, օրինակ՝ էլեկտրական ցնցումներով (կամ բնական կայծակներով), մի քանի ժամ անց անոթում, որտեղ փորձը կատարվել է, առաջացնում է ամինաթթուներ, ածխաջրածիններ և այլ միացություններ:

Սակայն այս տիպի փորձերը իրականում շատ քիչ առնչություն ունեն Երկրի վրա կյանքի առաջացման հետ: Ամենակարևորը այն է, որ այսպես առաջացած ամինաթթուները **չեզոք են**, ավելի ճիշտ՝ խառնված են **50% ձախ և 50% աջ ձևերով**, ինչը բնութագրական է բնական, ոչ կենսաքիմիական ռեակցիաների համար: Աստրոֆիզիկոսները կարող են շեշտել ոչ համաչափ էներգիայի աղբյուրի բացակայությունը:

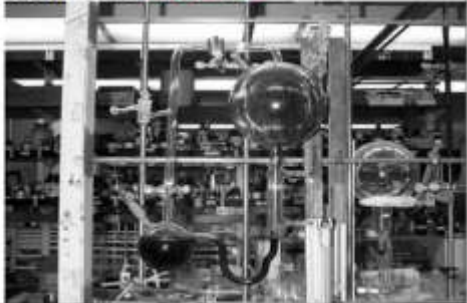
Մյուս կարևոր հանգամանքը հետևյալն է. նախնական Երկրի մթնոլորտը, ստեղծումից անմիջապես հետո (4.5–4 մլրդ տարի առաջ), **չեզոք էր** ($\text{CO}-\text{CO}_2, \text{N}_2$), իսկ ջրածին, մեթան և թթվածին գրեթե բացակայում էին: Ուստի, օրինակ, սինթեզվող ածխաջրածինները, որոնք պարունակում են 15 ածխածնի (C) մոլեկուլներ, չէին կարող առաջանալ հայտնի Ֆիշեր–Թրոփշ ռեակցիայի միջոցով:

Ըստ էության, պոլիմերիզացիայի և պոլիկոնդենսացիայի ռեակցիաները չէին կարող ապահովել բարդ մոլեկուլների բնական առաջացումը:

Are Miller-type experiments adequate ? No !

1. Terrestrial primitive atmosphere was not reduced (no H_2 , CH_4 → **no polymerization/condensation**)
2. Produced aminoacids are **racemic**.

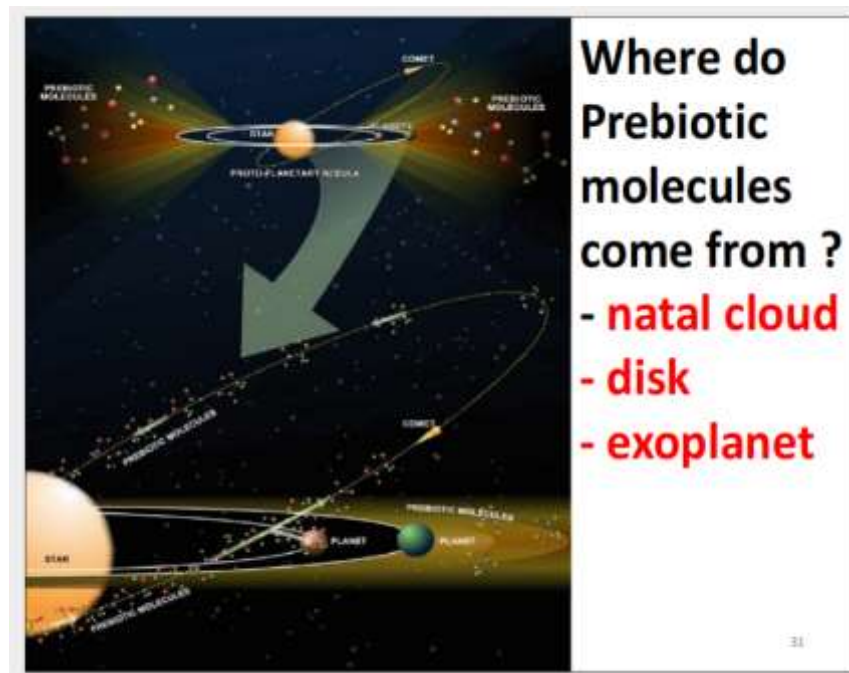
CH_4
 NH_3
 H_2O
 H_2
+
Energy source



Այսպիսով, մենք շարադրել ենք **հինգ քայլեր**, որոնք անհրաժեշտ են նախակենսամոլեկուլների առաջացման համար՝ Երկրից դուրս, և հետո՝ դրանց տեղափոխումը Երկրի վրա: Իսկ հետագա զարգացումները, մինչև

ինքնավերարտադրվող գոյացությունների ի հայտ գալը, գիտությանը դեռ պարզ չեն:

Ճշտենք միայն, թե որտեղից են Երկրի վրա հայտնվում և թափվում նման կենսամոլեկուլները, որոնք ձևավորվել են աստղաառաջացման շրջաններում կամ, որոշակի վերապահումներով, նախամոլորակային սկավառակում: Մոլորակի, օրինակ՝ Երկրի, վրա դա հնարավոր չէր՝ ոչ համաչափ գործոնի բացակայության պատճառով: Այս հարցը դեռևս բաց է և պահանջում է մանրամասն վերլուծություն:



Նկ. Որտեղից են հայտնվել նախակենսամոլեկուլները Երկրի (կամ այլ մոլորակի) վրա

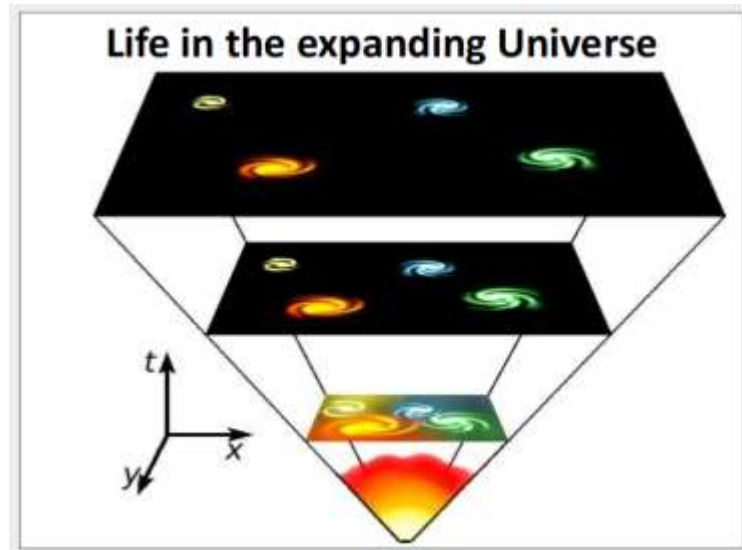
Երկու բառով՝ **լայնացող Տիեզերքում կյանքի առաջացման և գոյատևման մասին.** Դիտումներից հայտնի է, որ բուռն երևույթները Տիեզերքում ժամանակի ընթացքում մարում են:

Պարզ է, որ լայնացող Տիեզերքում ճառագայթավորումը նվազում է՝ ավելի մեծ ծավալում տարածվելու հետևանքով, և, կրկնեմ, աղբյուրների ուժգնությունը ևս պակասում է: Քանակական չափանիշ կարելի է սահմանել՝ օգտագործելով ճառագայթահարման դոզայի ժամանակային վարքագիծը:

Ճառագայթահարման դոզան սահմանվում է որպես ճառագայթման էներգիայի կլանված չափաբաժինը, որի հաշվարկի համար անհրաժեշտ են ճառագայթման

հոսքերը, ճառագայթման տևողությունը և միացության հետ փոխազդեցության հատվածը: Նման հաշվարկները ցույց են տալիս, որ Տիեզերքի տարիքի առաջին կեսում (6–7 մլրդ տարի) ճառագայթավորումը գերազանցել է միացության ստացած դոզայի ածխացման շեմային արժեքը, իսկ երկրորդ կեսում (7–13.5 մլրդ տարի) այն ավելի պակաս է եղել:

Այդ առումով, այլ հանգամանքները հաշվի չառնելով, կարելի է ասել, որ միայն վերջին **7–13.5 մլրդ տարի** Տիեզերքը եղել է բարենպաստ բարդ օրգանական միացությունների գոյատևման համար:



Ճառագայթահարման դոզաների հաշվարկի նախնական արդյունքներ

Դոզաները հաշվարկվել են աստղաառաջացման տիրույթների մոլեկուլային ամպերում՝ 1–10 մլն տարվա ճառագայթման տևողության համար:

1. Ճառագայթման հոսքերը (գերմանուշակագույն՝ FUV և տիեզերական մաքուր՝ SU) հայտնի են աստղաառաջացման արագությունից:
2. Ծանր էլեմենտների էվոլյուցիան հաշվի չի առնվել, այդ առումով հաշվարկված դոզաները կարելի է համարել ներքին սահմանը:

Հաշվարկների արդյունքները՝

- 13.8–7 միլիարդ տարի առաջ՝ դոզաները եղել են **2000–100000 eV/amu**
- 7–5 միլիարդ տարի առաջ՝ **1–50 eV/amu**

Ածխացման դոզան կազմում է մոտ **2000 eV/amu** (PAH ջրածնագրկում, C₆₀ ամորֆիզացիա):

Բարդ օրգանական միացությունների առաջացման և գոյատևման տեսակետից, Տիեզերքը բարենպաստ է նախակենսամոլեկուլների գոյության համար միայն վերջին **7 մլրդ տարի**, և այդ առումով կյանքը Երկրի վրա առաջիններից մեկն է:

Գրականություն

1. Tielens, A. Physics and Chemistry of the interstellar medium, Cambridge UP, 2005
2. Draine, B. Physics of the interstellar and intergalactic medium, Princeton UP, 2011
3. Shaw, A. Astrochemistry, Wiley, 2022
4. Maciel, W. Astrophysics of the interstellar medium, Springer, 2013
5. Whittet, D. Dust in the galactic environment, IOP, 2022
6. Yamamoto, S. Introduction to astrochemistry, Springer, 2017
7. Williams, D., Viti, S., Observational Molecular Astronomy, Cambridge UP, 2013