

Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра астрофізики

УДК 524.8, 539.1

Магістерська робота на тему:

**Коректність застосування програми CLOUDY для симуляції
еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті**

Виконав студент II курсу
спеціальності 104 Фізика та астрономія
групи ФЗФМ-21с Добра Олександр
Керівник: професор Богдан Мелех
Рецензент: доцент Юрій Кулініч

м. Львів – 2023р.

Анотація

Ця магістерська робота присвячена аналізу та оцінці коректності застосування програми CLOUDY для симуляції еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті. Метою роботи є перевірка надійності та точності результатів моделювання, отриманих за допомогою CLOUDY, та встановлення меж застосування цього програмного засобу для розв'язання різних астрофізичних задач. Для досягнення цієї мети були використані ретельно підібрані набори фізичних параметрів та початкових умов, що дозволили відтворити реалістичні умови на різних етапах еволюції Всесвіту. Порівняння результатів моделювання з експериментальними даними, спостереженнями та іншими надійними астрофізичними моделями показало, що програма CLOUDY не завжди є достатньо коректною та надійною для симуляції еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті. Робота також виявила сильні та слабкі сторони програми CLOUDY та запропонувала рекомендації для її подальшого вдосконалення.

Ключові слова: космологія: темні віки / реіонізація / перші зірки, CLOUDY, еволюція Всесвіту, перші молекули, астрофізика.

Abstract

This work is devoted to the analysis and evaluation of the correctness of the application of the CLOUDY program for simulating the evolution of the content of the first molecules in the Universe. The aim of the work is to verify the reliability and accuracy of the simulation results obtained by CLOUDY, and to establish the limits of applicability of this software tool for solving various astrophysical problems. To achieve this goal, carefully selected sets of physical parameters and initial conditions were used, which allowed to reproduce realistic conditions at different stages of the evolution of the Universe. Comparison of simulation results with experimental data, observations and other reliable astrochemical models showed that the CLOUDY program is not always sufficiently correct and reliable for simulating the evolution of the content of the first molecules in the Universe. The work also revealed strong and weak points of the CLOUDY program and suggested recommendations for its further improvement.

Keywords: cosmology: dark ages / reionization / first stars, CLOUDY, evolution of the Universe, first molecules, astrophysics.

Зміст

Вступ	3
Розділ 1. Основи моделювання еволюції Всесвіту	5
1.1 Основні етапи еволюції Всесвіту	5
1.2 Сітка хімічних реакцій.....	11
1.3 Моделі першого світла	14
1.4 Молекули в міжпротогалактичному середовищі	17
1.5 Молекули в внутрішньопротогалактичному середовищі та їх люмінесценція	20
Розділ 2. Перевірка коректності застосування CLOUDY для моделювання еволюції вмісту перших молекул	25
2.1 CLOUDY	25
2.2 Підготовка та попередні кроки для моделювання	30
2.3 Аналіз коду CLOUDY	33
2.4 Моделювання та аналіз результатів.....	35
Висновки	40
Список використаних джерел	41
Додатки	42

Вступ

Вивчення еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті є однією з ключових галузей сучасної астрофізики. Ця проблематика має велике значення для розуміння процесів, що відбувалися в ранніх стадіях Всесвіту та впливали на формування та розвиток галактик, зір та планетних систем. Для досягнення цієї мети, використовуються різноманітні астрохімічні моделі та програмні засоби. Одним з найпоширеніших і потужних інструментів для моделювання фізичних умов і властивостей молекулярного середовища є програма CLOUDY.

Проте, попри заяви розробників про можливість застосування даного коду для космологічного моделювання, використання програми CLOUDY для симуляції еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті вимагає детального дослідження та перевірки її коректності та надійності. Виникає проблема щодо відповідності результатів, отриманих з використанням CLOUDY, експериментальним даним та спостереженням. Також існує потреба у встановленні обмежень та точності цієї програми для конкретних астрофізичних задач.

Метою даної роботи є детальний аналіз та оцінка коректності застосування програми CLOUDY для симуляції еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті. Ми прагнемо вирішити проблему недостатньої достовірності та точності отриманих результатів та встановити межі застосування програми CLOUDY для вивчення різних астрохімічних процесів.

Для досягнення поставленої мети ми використовуємо ретельно підібрані набори фізичних параметрів та початкових умов, що дозволяють нам відтворити реалістичні умови на різних етапах еволюції Всесвіту. Після цього ми порівнюємо результати моделювання, отримані за допомогою програми CLOUDY, з експериментальними даними, спостереженнями та іншими надійними астрохімічними моделями.

Наша робота має на меті не лише перевірити коректність програми CLOUDY, але й виявити її сильні та слабкі сторони. Ми зосереджуємося на детальному аналізі параметрів та властивостей молекулярного середовища, таких як концентрація різних молекул, їх розподіл та еволюція у просторі та часі. Ми також досліджуємо вплив різних факторів, таких як температура, щільність, рівень іонізації та інші, на формування та розподіл перших молекул у Всесвіті.

Результати нашого дослідження важливі з практичної точки зору, оскільки вони допоможуть встановити надійність та межі застосування

програми CLOUDY у різних астрофізичних дослідженнях. Це дасть змогу науковцям більш точно та достовірно моделювати різні астрохімічні процеси, пов'язані з розвитком галактик, зорями та формуванням планет. Крім того, це дослідження може сприяти поліпшенню програми CLOUDY шляхом виявлення його потенційних недоліків та пропозиції рекомендацій для подальшого вдосконалення.

У підсумку, наша робота має на меті розкрити важливість та коректність застосування програми CLOUDY для симуляції еволюції Всесвіту, вмісту перших молекул та космічного моделювання загалом.

В своїй роботі я досліджую коректність застосування програми CLOUDY для симуляції еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті. Нуклеосинтез є ключовим процесом у формуванні молекулярної речовини у ранніх стадіях Всесвіту. Ця праця показує точність прогнозування вмісту перших молекул у Всесвіті за допомогою програми CLOUDY, що є популярним інструментом для астрофізичних розрахунків.

У даній роботі спочатку ми розглянемо мережі хімічних реакцій, які відбуваються в міжгалактичному середовищі і призводять до утворення, руйнування, рекомбінації та фотоіонізації молекул і атомів. Ми також представимо відповідні рівняння кінетики і енергетичного балансу, що допоможе нам отримати розуміння процесів, що відбуваються в цьому середовищі. Далі ми дослідимо моделі розподілу енергії для перших джерел світла, які з'являються у Всесвіті. Це дозволить нам визначити, як енергія поширюється в міжгалактичному середовищі та як вона впливає на реакції і процеси хімічного перетворення молекул. І відповідно проведемо обчислення кінетики хімічних реакцій в міжгалактичному середовищі та проаналізуємо вплив першого світла на щільність числа перших молекул, зокрема H_2 , HD і HeH^+ . Побудуємо чіткі аргументи які ми будемо моделювати в програмі CLOUDY та проаналізуємо отримані результати, щоб оцінити коректність застосування.

Усе це важливо не лише для фундаментальної науки, але і для застосувань у практиці. Розуміння еволюції молекул у міжгалактичному середовищі може мати значення для розробки моделей розвитку галактик, прогнозування властивостей зоряних систем та планет, а також для пошуку ознак життя в інших галактиках.

Розділ 1. Основи моделювання еволюції Всесвіту

1.1 Основні етапи еволюції Всесвіту

Всесвіт – це все, що ми можемо собі уявити: простір-час, а також вся матерія і енергія, яка його наповнює. Розміри всесвіту настільки великі, що його неможливо по-справжньому ні уявити, ні тим більше досягнути.

Зараз існує величезна кількість теорій походження Всесвіту, які щороку доповнюються, розширюються чи спростовуються. Проте початок історія дослідження всесвіту лежить в нашому давньому минулому і сягає Античності. Більшість древніх релігій та культур мають своє пояснення походження всесвіту. Перші космологічні моделі з'явилися ще в Древній Греції та Індії. Майже всі ранні теорії були геоцентричними. Та вже в XVII ст. Миколою Коперником була представлена геліоцентрична модель походження всесвіту – з Сонцем у центрі. Далі, з розвитком науки вчені створювали все нові й нові теорії про походження, структуру та властивості всесвіту[1].

Подальші спостережні вдосконалення привели до усвідомлення того, що Сонце є однією з декількох сотень мільярдів зірок Чумацького Шляху, що є однією з декількох сотень мільярдів Галактики у спостережуваному Всесвіті. Багато зірок в галактиці мають планети навколо. У найбільшому масштабі галактики розподілені рівномірно і однаково в усіх напрямках, а це означає, що Всесвіт не має ні краю, ні центру. У менших масштабах галактики розподілені в скупченнях і надскупченнях, які утворюють величезні нитки і порожнечі в просторі, створюючи величезну піноподібну структуру.

Згідно з науковими дослідженнями, вважається, що Всесвіт був утворений більш як 13 мільярдів років тому, і відтоді постійно розширюється з часу свого початку, відомого як Великий вибух - дуже гарячого, густого та щільного стану, який поступово почав розширюватись. В результаті цього розширення частинки матерії віддалялися одна від одної, знижуючи щільність Всесвіту та дозволяючи йому стати менш темним, холодним і густим[1]. Хоча розмір усього Всесвіту залишається невідомим, розмір спостережуваного Всесвіту на даний момент приблизно 93 мільярди світлових років в діаметрі. Всесвіт почав свій розвиток з моменту Великого вибуху, і з того часу неперервно збільшує свій розмір зі зростаючим темпом, що було доведено спостереженнями в XX ст.

Структура Всесвіту

Під час дослідження руху галактик було встановлено, що видима матерія у Всесвіті (зірки, галактики, туманності та міжзоряний газ) складає лише менше 5% фізичного Всесвіту. Залишок становлять темна матерія та темна енергія. Темна матерія складає близько 25%, тоді як темна енергія відповідає за більш як 69% маси та енергії у Всесвіті і відповідає за прискорення розширення простору. Зірки, планети та видимі газові хмари утворюють лише близько 6% звичайної матерії[2].

Деякі частини всесвіту занадто далеко від Землі або космічних приладів, щоб світло, що було випущене з часів Великого Вибуху, могло дійти до нас, тому вони знаходяться поза спостережуваним всесвітом. У майбутньому світло від далеких галактик матиме більше часу, щоб дістатися до нас, і тому можна очікувати, що будуть виявлені додаткові області. Однак, через закон Габбла, області, достатньо віддалені від Землі, віддаляються від неї швидше, ніж зі швидкістю світла і, крім того, швидкість розширення, здається, прискорюється через темну енергію.

В сучасному світі існує безліч моделей Всесвіту, які так чи інакше пояснюють його структуру. Основою усіх космологічних моделей, які обговорюють у науковій літературі, є розв'язки рівнянь Айнштейна для однорідного ізотропного Всесвіту. В наслідок нових спостережень ці теорії розширювались і доповнювались, щоб пояснити нові явища та відкриття. Найважливішими з них були: відкриття космічного мікрохвильового фонового (реліктового) випромінювання; розширення Всесвіту та прискорення цього розширення і так далі.

Залежно від типу речовини, яка заповнює Всесвіт і визначає динаміку розширення та кластеризацію маси в післярекомбінаційну епоху, такі моделі ще поділяють на баріонна (open baryonic model (OBM)), моделі з гарячою темною матерією (hot dark matter (HDM)), моделі з холодною темною матерією (cold dark matter (CDM)), моделі зі змішаною гарячою і холодною темною матерією (mixed dark matter (MDM)), моделі з космологічною сталою Λ і холодною темною матерією (Λ CDM), моделі зі змішаною гарячою і холодною темною матерією та космологічною сталою (mixed lambda model (MLM))[2].

Одною із основних сучасних космологічних моделей є Модель Лямбда-CDM, яка в свою чергу передбачає, що всесвіт почав свій розвиток з єдиної події - Великого вибуху, після якого настало експоненційне розширення простору, відоме як космологічна інфляція. На сьогоднішній день, цей сценарій

разом зі стандартною моделлю фізики елементарних частинок із космологічною інфляцією, є єдиним, що узгоджується зі спостережуваним розширенням простору, розподілом легких елементів у Всесвіті та просторовою текстурою кутових неоднорідностей (анізотропії) в реліктовому випромінюванні.

Проте, наразі дослідження різних аспектів Λ CDM моделі продовжуються, і їхні результати можуть змінюватися з надходженням нової інформації. Вимірювання відстаней до дуже далеких галактик або наднових є непевними, що може вплинути на оцінки ключових параметрів, таких як Параметр Хаббла. Крім того, Λ CDM модель не містить чіткої фізичної теорії темної матерії та темної енергії, або пояснення їх походження.

Епохи еволюції Всесвіту

В моїй роботі важливими будуть знання про етапи еволюції Всесвіту. Загальна концепція еволюції Всесвіту, як ми його знаємо, включає в себе численні етапи розвитку, які проходилися через час.

В сучасних фізичних моделях, які описують походження та еволюцію нашого Всесвіту, можна виділити кілька вікових періодів. На початку вічного минулого, все в нашому Всесвіті перебувало в метастабільному стані скалярного поля з планківською густиною енергії. Далі настала *епоха Великого вибуху*, коли в одній квантовій ділянці просторово-часової піни, через квантові флуктуації, сформувався 3+1 простір-час з параметрами фундаментальних взаємодій. Ці взаємодії після розпаду первинного стану та низки фазових переходів призвели до чотирьох фізичних взаємодій нашого Всесвіту та набору елементарних частинок, які заповнили наш Всесвіт. Наступна стадія - *інфляція* - була короткочасною стадією дуже швидкого збільшення масштабів, коли флуктуації метрики простору-часу квантових масштабів розтягувалися до розмірів сучасних галактик, скупчень, надскупчень та порожнин. Інфляція закінчилася синтезом частинок та квантів полів, що відповідають температурі на момент кінця інфляції. Далі, *баріосинтез*, коли кварк-глюонна плазма вистигла, залишаючи в осаді важкі частинки - адрони та їхні античастинки. Потім *адронна ера*: короткоживучі адрони розпадалися на легші частинки, включаючи протони, нейтрони та античастинки. Ці частинки та античастинки перебували в термодинамічній рівновазі з квантами електромагнітного випромінювання високих енергій гігаелектрон-вольтів. Ця ера закінчилася анігіляцією речовини та антиречовини. Потім почалась *лептонна ера*: лептони, такі як електрони, мюони, тау-частинки та відповідні їм нейтрино, перебували в

термодинамічній рівновазі з випромінюванням. Ця ера закінчилася анігіляцією пар частинка-античастинка, залишився надлишок електронів над позитронами, кванти електромагнітного випромінювання та нейтрино, які, через слабку взаємодію з рештою частинок, почали вільно поширюватися у просторі. Наступною стала *epoca нуклеосинтезу*: протони та нейтрони "злипаються", утворюючи ядра легких елементів. Після цього почалась *epoca домінування випромінювання* - на цьому етапі енергія квантів реліктового випромінювання виявилась більшою, ніж потенціал іонізації атомів водню і гелію. Баріонна речовина була повністю іонізована, середовище стало непрозорим через комптонівське і томпсонівське розсіювання квантів на електронах. Настає момент, коли густина енергії випромінювання стає меншою за густину енергії речовини, що починає домінувати і визначати темп розширення. Наступним стала ера космологічної рекомбінації - це короткочасна епоха ($z_{\text{rec}} \approx 1\ 000$), під час якої ступінь іонізації водню зменшувався від 1 до приблизно 0. Середовище стало прозорим для випромінювання, і воно почало вільно поширюватися у всіх напрямках. За нею йшла *epoca Темних віків* - У цей період всесвіт був прозорим для випромінювання, що дало змогу фотонам реліктового випромінювання ізотропно надходити у кожену точку зі сфери останнього розсіювання. Тиск у речовині був дуже малий, що спричинило збільшення амплітуди збурень густини речовини під дією самогравітації. Густина енергії матерії була значно більша від густини енергії випромінювання. У цей період у всесвіті ще не було зірок і галактик, що були б джерелами світла. Всі матеріальні об'єкти склались з газу, що збирався в хмари. Це був період високої енергії, коли випромінювання переважало над гравітаційною притяжністю, і тому всесвіт швидко розширювався. Нейтральний газ з первинним хімічним вмістом визначив темп розширення всесвіту, і з часом під впливом самогравітації почали утворюватися галактики. Далі почалась *epoca зір і галактик*, також відома як «*Космічний світанок*»: відбувалася народження перших зір, які у воднево-гелієвому середовищі були дуже масивними - близько 100 мас Сонця. Такі зорі мали дуже короткий час життя і завершували свій життєвий цикл спалахом наднової величезної потужності. Яскраве випромінювання цих зір та ударні хвилі, що виникали внаслідок наднових спалахів, іонізували міжзоряний та міжгалактичний газ, що дозволило міжзоряному середовищу збагатитись важкими елементами, необхідними для утворення зір менших мас. Після цього почалася епоха бурхливого зореутворення і формування галактик. Розширення Всесвіту відбувалося зі сповільненням, оскільки самогравітація речовини переважала. Проте, через 6 млрд років, розширення Всесвіту почало

прискорюватись[3]. Ця епоха триває до сьогоднішнього дня і характеризується появою темної енергії, подібної до космологічної сталої. Ця темна енергія почала переважати за густиною енергії звичайну матерію, близько 4 млрд років тому, коли наша Земля тільки формувалась. Цей процес призвів до прискореного розширення Всесвіту і розвитку його структури, що відображається в зміні форми галактик та розміру космічних структур. І заключним етапом існування всесвіту стане *епоха темної енергії* – через прискорене розширення Всесвіту швидкість віддалення галактик одна від одної зростатиме[2].

У моєму дослідженні я розглядатиму значення двох ключових епох у розвитку Всесвіту: Темних віків та Космічного світанку. Ці епохи мають велике значення для нашого розуміння процесу нуклеогенезу та формування матерії у всесвіті. У цей період відбувалися важливі процеси формування структури всесвіту, такі як утворення галактик та зірок, процеси зв'язані з фотонною рекомбінацією, коли протони та електрони з'єдналися, що дозволило світлу вийти з густого газу і стати видимим.

Розуміння цих двох епох дозволить нам краще зрозуміти процеси, які відбувалися у всесвіті, та як вони вплинули на розвиток матерії у всесвіті, включаючи нашу власну планету та зоряну систему. Також це допоможе нам зрозуміти, як розвивався нуклеогенезис у всесвіті та які наслідки це могло мати.

Будова Всесвіту

Світ, який нас оточує, складається з атомів. Атоми, в свою чергу складаються з ядер та електронів, а ядра атомів із нуклонів — протонів та нейтронів. Залежно від числа протонів у ядрі атоми поділяються на різні хімічні елементи. Хімічні властивості атомів визначаються його електронами, але кількість електронів у атомах відповідає кількості протонів, тому саме кількість протонів визначає номер хімічного елемента[1].

Поширеність різних хімічних елементів у природі неоднакова. На Землі найпоширенішим елементом є залізо. У Всесвіті загалом найпоширенішим елементом є водень, другим за поширеністю — гелій. Водень — найпростіший з хімічних елементів. Основний ізотоп водню має ядро, яке складається з одного протона. Сучасні уявлення про походження та розвиток Всесвіту стверджують, що приблизно 13 млрд років тому у Всесвіті не було інших хімічних елементів крім водню. Точніше, не було навіть водню, бо тоді протони та електрони ще не об'єдналися в атоми. Всесвіт на той час був гарячою плазмою — складався з протонів, електронів та електромагнітного

випромінювання. Решта хімічних елементів утворилася у процесі охолодження цієї плазми, під час якого протони об'єднувалися й утворювали більші, складніші ядра. Цей процес називається нуклеосинтезом.

Вважається, що перші нуклони були сформовані з кварк-глюонної плазми під час Великого вибуху, поки вона охолоджувалась нижче двох трильйонів градусів. За кілька хвилин з протонів та нейтронів були сформовані ядра до берилію та літію (обидва з масовим числом 7), тоді як ядра важчих елементів майже не утворились[4]. В цей час могло утворитись трохи Бору, але процес зупинився до утворення карбону, оскільки цей елемент вимагає куди більшої густини гелію та часу для утворення, ніж було під час первинного нуклеосинтезу Великого Вибуху. Цей процес синтезу практично зупинився через 20 хвилин через падіння температури та густини середовища, коли Всесвіт продовжував розширюватись. Цей первинний процес, нуклеосинтез Великого Вибуху, був першим типом нуклеогенезису, котрий відбувся у Всесвіті[2].

Джерела виникнення елементів у всесвіті

Утворення ядер складніших атомів відбувалося не одразу. Його можна поділити на чотири стадії[3]:

- Перша стадія, впродовж якої утворилися легкі ядра, сталася одразу після Великого вибуху.
- Друга стадія — утворення ядер важчих елементів аж до заліза — відбувається в надрах зір.
- Третя стадія — утворення хімічних елементів, важчих заліза — відбувається під час спалахів наднових.
- Процес четвертого типу — ядерний синтез легких ядер, під впливом космічного випромінювання — триває з невеликою швидкістю весь час.

1.2 Сітка хімічних реакцій

Важливість розуміння сітки хімічних реакцій в контексті космології та програми CLOUDY полягає в тому, що це дозволяє зрозуміти, як розподіляються хімічні елементи в просторі і часі, включаючи ранні епохи Всесвіту. Для цього необхідно враховувати взаємодію різних елементів і джерел їх утворення та руйнування, таких як зірки, галактики, гало темної матерії, міжгалактичний газ і більш складні молекули[5].

У програмі CLOUDY сітка хімічних реакцій описується системою зв'язаних диференціальних рівнянь, що включають еволюцію густини, температури та іонізаційного стану газу. Ці рівняння враховують хімічні реакції, утворення та руйнування молекул, процеси фотоіонізації та фотонейтралізації, а також взаємодію газу з випромінюванням.

Знання сітки хімічних реакцій є важливим для розуміння космологічних явищ, таких як формування темних об'єктів в ранні епохи Всесвіту та їхнє вплив на газову реєстрацію, руйнування молекулярного водню та утворення перших зірок, еволюцію газу в галактиках і галактичних живильних джерелах, а також для прогнозування спостережень темної матерії. Дослідження сітки хімічних реакцій в програмі CLOUDY може привести до більш точних прогнозів космологічних явищ і допомогти в розумінні ранньої еволюції Всесвіту.

Стаття, яка була взята за основу дослідження, представляє собою комплексний аналіз формування та руйнування молекул H_2 , HD та HeH^+ у міжпротогалактичному середовищі епох Темних віків та Космічного світанку. Дослідження базується на чисельному розв'язанні рівнянь, що описують процеси фотоіонізації, фотодисоціації, зарядження та рекомбінації для цих молекул.

Автори статті проаналізували вплив відмінностей в космологічних умовах раннього Всесвіту, таких як вміст хімічних елементів, густини, температури, на формування та руйнування цих молекул. Вони дослідили вплив різних чинників, таких як космічна радіація, механічні удари та інші, на процеси формування та руйнування молекул.

Для того, щоб врахувати ці процеси, було використано мінімальний набір реакцій, які є важливими для епох, починаючи з космологічної рекомбінації, темних віків, космічного світанку і реіонізації. У порівнянні з мінімальним набором реакцій, важливих для епохи Темних віків, було додано важливі реакції для епохи Космічного світанку. Окрім того, було запропоновано нове наближення швидкості фотодисоціації з H₂ та HD з використанням останніх і точних обчислень ефективного поперечного перерізу для цієї мети. Також були визначені ефективні поперечні перерізи фотоіонізації водню від базового рівня та першого метастабільного 2s[5].

У статті було звернуто увагу на те, що іонізація водню важлива для утворення та руйнування молекул, тому було запропоновано більш точне аналітичне наближення ефективних поперечних перерізів фотоіонізації водню. Особлива увага була приділена реакціям фотодисоціації H₂ та D₂, які стають вирішальними для руйнування молекул водню та дейтериду водню першим світлом перед реіонізацією[5]. Таблицю із відповідними реакціями, які використовували автори буде наведено в Додатку А.

Також було обчислено еволюцію фракцій, x_i , нейтральних атомів, молекул та іонів від космологічної рекомбінації до реіонізації водню при z_{rei} . Кінетичні рівняння хімічних реакцій в загальному вигляді виглядають наступним чином[5]:

$$-(1+z)H \frac{dx_i}{dz} = \sum_{mn} C_{mn}^{(i)} f_m f_n x_m x_n + \sum_m R_{m\gamma}^{(i)} f_m x_m - \sum_j C_{ij} f_i f_j x_i x_j - \alpha_i f_i x_i,$$

Де z - червоне зміщення; $C_{mn}^{(i)}$ - швидкість реакції зіткнення з реагуючими речовинами, m і n , яка призводить до утворення атома, молекули, іона, $R_{m\gamma}^{(i)}$ - швидкість променевої реакції для реагуючої речовини, m , яка призводить до утворення атома, молекули, іона, C_{in} - швидкість руйнування i - реагенту при зіткненні з n - реагентом; і α_i - швидкість фоторекомбінації реагуючої речовини, i . Сумарна частка основних хімічних елементів в одиниці щільності числа водню, позначається як f_m , а саме $f_{\text{He}} = n_{\text{He}}/n_{\text{H}}$ для реагуючої речовини m , що містить гелій; $f_{\text{D}} = n_{\text{D}}/n_{\text{H}}$ для реагуючої речовини, m , що містить дейтерій; $f_{\text{H}} \equiv 1$ і для реагуючої речовини, m , що містить тільки водень. Для хімічних видів, що містять тільки водень, фракція, m , дорівнює $x_m = n_m/n_{\text{H}}$, де n_m - щільність числа видів m , а n_{H} - загальна щільність числа водню; для

видів, що містять дейтерій і гелій, $x_m = n_m/n_D$ і $x_m = n_m/n_{He}$ відповідно, де n_D і n_{He} - загальна кількість щільностей дейтерію і гелію.

І відповідна система кінетичних рівнянь разом з рівняннями розширення Всесвіту та енергетичного балансу для баріонної складової[5]:

$$\begin{aligned}
 H &= \sqrt{\Omega_r(1+z)^4 + \Omega_m(1+z)^3 + \Omega_{de}(1+z)^{3(1+\omega_{de})}}, \\
 \frac{dT_b}{dz} &= \frac{2T_b}{1+z} + \frac{8\sigma_T a_r T_r^4}{3m_e c H(1+z)} \frac{x_e}{1+f_D+f_{He}+x_e} (T_b - T_r), \\
 &+ \alpha_{ff} \frac{8\sigma_T a_r T_{fl}^4}{3m_e c H(1+z)} \frac{x_e}{1+f_D+f_{He}+x_e} (T_b - T_{fl}), \\
 &+ \alpha_{fl} \frac{8\sigma_T a_r T_{fl}^4}{3m_e c H(1+z)} \frac{x_e}{1+f_D+f_{He}+x_e} (T_b - T_{fl})
 \end{aligned}$$

де σ_T — поперечний переріз розсіяння Томсона, a_r — випромінювальна постійна, а m_e — маса електрона.

Дане дослідження дозволило отримати більш детальне розуміння механізмів, які лежать в основі формування та руйнування молекул в ранньому Всесвіті. Розуміння цих механізмів є важливим для розвитку космології, а також для кращого розуміння фізичних процесів, які відбуваються в галактиках та зорях. Крім того, дані результати мають практичне застосування для чисельного моделювання космологічних процесів, таких як формування та еволюція галактик та космічних структур.

1.3 Моделі першого світла

Однією з важливих моделей, що використовуються для вивчення першого світла, є модель «реіонізації». Ця модель пояснює, як перші галактики та зірки виробляли інтенсивне ультрафіолетове випромінювання, яке іонізувало водень у ранньому Всесвіті, змушуючи його ставати прозорим для цього випромінювання. Спостереження космічного мікрохвильового фонового випромінювання та розподілу галактик показують, що реіонізація відбулася між 300 мільйонами та 1 мільярдом років після Великого вибуху[4].

Інша модель, яка використовується для вивчення першого світла, — це модель «первинного нуклеосинтезу». Ця модель пояснює, як перші протони та нейтрони об'єдналися, утворивши гелій та інші легкі елементи протягом перших кількох хвилин після Великого вибуху. Спостереження космічного мікрохвильового фонового випромінювання та великої кількості легких елементів у Всесвіті підтверджують цю модель.

Крім того, чисельне моделювання використовується для вивчення формування перших структур у Всесвіті. Ці симуляції включають закони фізики для моделювання еволюції Всесвіту з часом, від початкових умов після Великого вибуху до наших днів. Порівнюючи результати цього моделювання зі спостереженнями, астрофізики можуть уточнити своє розуміння фізичних процесів, які призвели до утворення перших галактик, зірок і чорних дір.

Загалом, вивчення першого світла є фундаментальним аспектом астрофізики, оскільки воно дає уявлення про формування та еволюцію Всесвіту в цілому. Моделі та спостереження, які використовуються для вивчення цієї епохи історії Всесвіту, продовжують удосконалюватись у міру появи нових даних, що веде до глибшого розуміння фізичних процесів, які сформували Всесвіт, який ми спостерігаємо сьогодні.

Перше світло у Всесвіті випромінювали не зірки чи галактики, а космічний мікрохвильовий фон (СМВ), слабе світіння випромінювання, яке заповнює все небо. СМВ виник, коли Всесвіт став прозорим для світла, приблизно через 380 000 років після Великого вибуху. До цього Всесвіт був гарячою і щільною плазмою електронів і ядер, яка постійно розсіювала світло, роблячи його непрозорим.

Однак СМВ — не єдине джерело інформації про ранній Всесвіт. Астрономи також зацікавлені у вивченні перших зірок і галактик, які утворилися після СМВ, і того, як вони змінили стан міжгалактичного газу. Цей період, відомий як епоха реіонізації, тривав приблизно від 250 мільйонів до 1

мільярда років після Великого вибуху, і він знаменує перехід від темного й нейтрального Всесвіту до світлого й іонізованого[4].

Щоб зрозуміти, як перші джерела світла вплинули на еволюцію Всесвіту, дослідники використовують комбінацію спостережень і моделювання. Спостереження включають виявлення слабких радіосигналів від нейтрального газоподібного водню, вимірювання поляризації СМВ та пошук далеких галактик і квазарів, які випромінюють ультрафіолетове світло. Моделювання включає розв'язання складних рівнянь, які описують фізику гравітації, газову динаміку, перенос випромінювання та утворення зірок на суперкомп'ютерах.

В епоху Космічного світанку випромінювання перших джерел (теплих або гарячих гало, перших карликових галактик із зірками Pop III і ударних хвиль), іменованих тут першим світлом, починає впливати на кінетику хімічних реакцій, збуджуючи роколивальні рівні молекул; а в кінці «Космічного світанку» він починає іонізувати водень, позначаючи початок епохи реіонізації.

В кожен момент Темних віків і Космічного світанку сумарна спектральна щільність енергії випромінювання дорівнює сумі щільності енергії СМВР і першої світлої[6]:

$$J_{\nu} = \frac{4\pi}{c} [B_{\nu}(T_{\text{СМВ}}) + \alpha_{\text{fl}} B_{\nu}(T_{\text{fl}})].$$

Оскільки швидкості іонізації або дисоціації атомів і молекул обчислюються шляхом інтегрування за енергією добутку поперечного перерізу та інтенсивності на енергію фотона, їх можна представити у вигляді наступної суми[6]:

$$R_{i\gamma} = R_{i\gamma}(T_{\text{СМВ}}) + \alpha_{\text{fl}} R_{i\gamma}(T_{\text{fl}}).$$

Збудження зіткнення, іонізація і рекомбінація атомарного водню в ці епохи незначні.

Випадок В реалізується, коли характеристичний час фотоіонізації нижче або близько до часу життя атомів водню на метастабільному рівні 2s. Ми бачимо, що ця умова виконується при $z \gtrsim 1000$, коли температура СМВР становила $\gtrsim 3000$ К. Щільність енергії першого світла, що з'явився на Космічному світанку, збільшується, але не досягає значення, коли населення метастабільного рівня стає важливим..

Якщо розглянути просту еволюційну модель температури випромінювання першого світла[5]:

$$T_{\text{fl}} = T_* \left(\frac{1 + z_{\text{rei}}}{1 + z} \right)^p, \quad \text{with } p = n \left(\frac{1 + z}{1 + z_{\text{rei}}} \right)^{1/3}, \quad (6)$$

Спектральні щільності енергії для всіх цих моделей показані на рис. 2. Потенціал іонізації атомів водню знаходиться у віденському діапазоні *планківського* розподілу. Таким чином, чим вище температура випромінювання в момент, коли $x_{\text{HI}} \approx 0,5$, тим нижче повинен бути коефіцієнт розведення. Для порівняння наведемо на цьому малюнку спектральну щільність енергії CMBR при тих же червоних зсувах, а також в поточну епоху ($z = 0$). Спостережуваний космічний інфрачервоний фон також показано. Таке порівняння показує, що на частотах нижче $2,5 \times 10^4$ ГГц ($\lambda > 0,1$ мкм) інтенсивність такого першого світла істотно нижче, ніж CMBR і CIB. Однак він може збуджувати ро-вібраційні рівні найбільш поширених молекул, щоб отримати спектральні спотворення CMBR в короткохвильовому діапазоні[5].

1.4 Молекули в міжпротогалактичному середовищі

Розуміння нуклеосинтезу молекул в міжпротогалактичному та внутрішньопротогалактичному середовищі та їх люмінесценція є одним із ключових аспектів мого дослідження. Це дозволяє розширити наше знання про фізичні і хімічні процеси, які відбуваються в галактиках та впливають на їхні властивості.

Вивчення нуклеосинтезу молекул у міжпротогалактичному середовищі допомагає нам розкрити процеси формування та еволюції галактик у ранніх стадіях Всесвіту. Велике значення має вивчення реакцій, що відбуваються під час формування молекулярного водню та інших молекул, які служать будівельними блоками для зоряних систем та планетних атмосфер. Розуміння цих процесів допомагає нам пояснити виникнення різних хімічних складових у галактичних об'єктах і визначити вплив їхнього вмісту на формування життя.

Окрім того, вивчення люмінесценції молекул у внутрішньопротогалактичному середовищі дозволяє нам отримати інформацію про фізичні умови та процеси, що відбуваються в протогалактиках. Аналізуючи спектральні лінії випромінювання, які з'являються під впливом взаємодії молекул з випромінюванням, ми можемо визначити температуру, щільність та хімічний склад газового середовища.

Міжпротогалактичне середовище (IGM) - це газ, який існує між протогалактиками в ранньому Всесвіті. Це гаряча, дифузна плазма, яка складається в основному з водню і гелію, зі слідами інших елементів. Вважається, що IGM сформувався із залишків Великого вибуху, і він все ще розвивається сьогодні.

IGM важливий з ряду причин. По-перше, це джерело газу, який в кінцевому підсумку утворює зірки і галактики. По-друге, це основний внесок у космічний мікрохвильовий фон (СМВ). По-третє, вона відіграє певну роль у формуванні великомасштабної структури у Всесвіті[4].

IGM - це дуже складне середовище для вивчення. Він дуже слабкий, і важко відокремити сигнал IGM від сигналів інших об'єктів, таких як зірки і галактики. Однак астрономи досягли значного прогресу у вивченні IGM в останні роки.

Іншим важливим інструментом для вивчення IGM є космічний мікрохвильовий фон. СМВ - це слабе світіння світла, яке вважається залишком

Великого вибуху. Вивчаючи СМВ, астрономи можуть дізнатися про температуру і щільність Всесвіту, коли він був дуже молодим.

За результатами дослідження еволюції щільності чисел H, D і He, а також температури СМВР і баріонів матерії протягом епох Темних віків і Космічного світанку до реіонізації, можна зробити наступні висновки можна зрозуміти як перше світло, яке іонізує атоми і молекули, має значний вплив на еволюцію температури баріонного газу[7].

Ці результати вказують на значення першого світла у формуванні та руйнуванні молекул у космічному середовищі протягом епох Темних віків і Космічного світанку до реіонізації.

Після детального аналізу виявлено, що негативні іони водню (H^-) найбільш чутливі до впливу першого світла. Це пояснюється їх низьким порогом дисоціації, що становить 0,75 еВ. Фотодисоціаційна реакція $\text{H}^- + \gamma \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^-$ ефективно зменшує щільність числа H^- , поки іонізація водню не починає переважати. Зі збільшенням щільності числа вільних електронів значення реакції $\text{H} + \text{e}^- \rightarrow \text{H}^- + \gamma$ зростає, що в свою чергу призводить до збільшення щільності числа H^- . Однак цей ефект є тимчасовим, оскільки швидке зростання щільності числа фотонів згодом робить процес фотодисоціації домінуючим[5].

Для молекул водню, які мають низьку щільність енергії першого світла, спостерігається збільшення щільності числа гідридних іонів гелію (HeH^+) при збільшенні іонізації атомарного водню. Це пояснюється тим, що реакція $\text{He} + \text{H}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \gamma$ переважає над реакцією $\text{HeH}^+ + \gamma \rightarrow \text{He} + \text{H}^+ \cdot \text{H}_2^+$ [5].

Отже, можна дійти висновку про важливість першого світла у взаємодії з іонами водню та гелію, що веде до змін їх чисельної щільності протягом ранніх епох космології.

Щільність числа найбільш поширених молекул H_2 , які мають поріг дисоціації на рівні 4,53 еВ, різко зменшується, коли щільність числа фотонів з енергією вище визначеного порогу перевищує певне значення. Це призводить до зниження швидкості прямої дисоціації H_2 , яка становить приблизно від $10^{(-18)}$ до $10^{(-19)} \text{ cm}^3 \text{ s}^{(-1)}$. Таким чином, спектральний розподіл енергії першого світла і його залежність від часу впливають на процеси формування та дисоціації молекул під час Космічного світанку[8].

Для більш детального розуміння цього впливу, досліджено відношення щільності числа молекул у моделях з першим світлом. Це співвідношення чітко відображає залежність щільності числа молекул від наявності першого світла.

1.5 Молекули в внутрішньопрогоалактичному середовищі та їх люмінесценція

Внутрішньопрогоалактичне середовище - це газ, який існує між прогоалактиками в ранньому Всесвіті. Це гаряча, дифузна плазма, яка складається в основному з водню і гелію, зі слідами інших елементів. Вважається, що IGM сформувався із залишків Великого вибуху, і він все ще розвивається сьогодні.

Коли в IGM утворюються молекули, вони можуть випромінювати світло. Таке світло називається люмінесценцією. Люмінесценція - це процес, при якому молекула поглинає енергію, а потім випромінює її у вигляді світла. Енергія, яка поглинається, може надходити з різних джерел, таких як ультрафіолетове випромінювання від квазара або тепло від наднової.

Люмінесценція молекул в IGM може бути використана для вивчення IGM. Вивчаючи світло, яке випромінюється молекулами, астрономи можуть дізнатися про температуру, щільність і склад IGM.

Для внутрішнього прогоалактичного середовища справедливі ті самі розрахунки. Припускаючи, що прогоалактики – це сферичні верхні гало в багатоконпонентному Всесвіті, які наповнені динамічною темною енергією, темною матерією, баріонною матерією і двома «видами» теплового випромінювання, а саме CMBR і першим світлом, яке з'явилося в епоху Космічного світанку. Оскільки тимчасова залежність щільності і температури баріонів в гало на стадіях до, під час і після віріалізації відрізняється від фонових, то і щільність числа перших молекул теж різна. Більш того, теплі і гарячі ореоли можуть злегка світити на космічному мікрохвильовому тлі. Для аналізу впливу першого світла на велику кількість перших молекул та їх люмінесценцію в гало можна використати теорію космологічних збурень та гало-модель для отримання точних розрахунків фізичних умов та інтеграцій відповідних кінетичних рівнянь[8].

Якщо обрахувати фізичні умови та хімію гало, моделювавши еволюцію одного сферичного збурення у чотириконпонентному Всесвіті (холодна темна матерія, баріонна матерія, темна енергія та теплове реліктове випромінювання), починаючи з лінійної стадії в ранню епоху, через квазілінійну стадію, точку повороту та колапс до віріалізованого стану при $M_h \sim 10^6 M_\odot$. Початкові амплітуди адіабатичного обурення в конформному ньютонівському калібрі для цієї шкали приймаються наступним чином: для теплового випромінювання $\delta_{tr} = 1,5 \times 10^{-4}$, для складових речовини $\delta_{cdm} = \delta_b = 1,125 \times 10^{-4}$, а для

фантомної темної енергії $\delta_{de} = -3,376 \times 10^{-6}$ при $z_{\text{init}} = 10^8$, які відповідають середнім значенням квадратів кореня в цьому масштабі в космологічній моделі з параметрами, представленими у Вступі. При червоному зсуві z_{init} таким збуренням є супергоризонтальний, який входить в горизонт частинок при $z_{\text{eh}} \approx 2,5 \times 10^6$. Інтегрування системи рівнянь, що впливає з систем Ейнштейна та збереження енергії, дає момент віріалізації $z_v = 23,8$, коли перецільність $\rho_m(z_v)/\bar{\rho}_m(z_v)$ досягає значення $\Delta_v = 178$ [5].

Маса гало $M_h [M_\odot]$, ковзне хвильове число лінійного (насінного) збурення $k [Mpc^{-1}]$ і ковзний радіус $r_h [kpc]$ після віріалізації пов'язані як[5]:

$$\frac{M_h}{M_\odot} \approx 1160 \Delta_v (1 + z_v)^3 \Omega_m h^2 r_h^3 \approx 4.5 \times 10^{12} \Omega_m h^2 k^{-3},$$

Кінетична температура баріонного газу в гало в епохи Темних віків і Космічного світанку визначається його взаємодією з тепловим реліктовим випромінюванням і першим світлом і адіабатичним нагріванням над стисненням. Отже, еволюцію температури баріонного газу T_b при $6 \leq z \leq 850$ можна отримати інтеграцією рівняння енергетичного балансу для внутрішньогало-баріонної речовини[5]:

$$\frac{dT_b}{dz} = \text{r.h.s. (3)} + \frac{2}{3} \frac{T_b}{1+z} \frac{d\delta_b}{dz}$$

Кінетична температура газу в такому гало після віріалізації становить близько 2800 K і не залежить від маси гало. Ореол з такою температурою називають «теплим» німбом[5].

У такої гало-моделі, щільність числа частинок баріона (і лептона) залишається незмінною після віріалізації, в той час як щільність числа молекул, протонів і електронів змінюється за допомогою процесів рекомбінації і фотоіонізації атомів і молекул, а також реакцій утворення і руйнування молекул. Збільшення щільності і температури баріонного газу призводить до збільшення щільності числа молекул H_2 і HD навіть після віріалізації істотно більше, ніж в Δ_v разів. Причому в гарячих ореолах щільність числа цих молекул вище, ніж в теплих. Щільність числа молекулярних іонів HeH^+ співвідношення майже постійне[5].

Щоб оцінити вплив першого світла на хімію внутрішнього гало-середовища, необхідно відзначити, що спектральна щільність випромінювання в гало більше фонові і це надлишок швидко збільшується з часом в епоху Космічного світанку. Аналізуючи вплив першого світла з різними значеннями

коефіцієнтів у всіх панелях накладаються лінії для H_2 і HD. І відповідно ці молекули руйнуються до реіонізації. Чим більше спектральна щільність першого світла, тим раніше вони зникають внаслідок фотодисоціації.

Перше світло з температурою, $T_{\text{fl}} \sim 10^3 - 10^4$, може порушувати обертально-коливальні енергетичні рівні перших молекул, люмінесценція гало в Космічній Зорі складно залежатиме від спектральної щільності енергії фонового випромінювання та щільності числа молекул.

Щоб оцінити світіння гало в молекулярних лініях, можна обчислити популяцію ротаційних рівнів[5]:

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j \neq i} n_j R_{ji} - n_i \sum_{j \neq i} R_{ij} + 3Hn_i,$$

Рішення системи рівнянь для популяцій ротаційних рівнів $J = 0 - 5$ дає можливість обчислити температуру збурення від i -рівня до j -рівня[5]:

$$T_{\text{ex}} = \frac{h\nu_{ij}}{k_B} / \ln \frac{n_j g_i}{n_i g_j}$$

Інтенсивність мікрохвильового випромінювання виражається в одиницях яскравості температури[5]:

$$T_{ij}^{\text{br}} \equiv \frac{I_{\nu_{ij}}}{2k_B \nu_{ij}^2}.$$

Оскільки світіння Темних віків і ореолів космічного світанку в лініях перших молекул відбувається на космічному мікрохвильовому фоні на одних і тих же частотах, розумно розрахувати температуру перепаду яскравості[5]:

$$\delta T_{ij}^{\text{br}} \equiv T_{ij}^{\text{br}} - T_{\text{СМВ}}$$

У випадку оптично тонкого верхнього гало рівняння радіаційного переносу дає наступний вираз для температури перепаду яскравості[5]:

$$\delta T_{ij}^{\text{br}} \approx \frac{5 \times 10^{36} n_i A_{ij}}{(1+z)\nu_{ij}^2} \sqrt{\frac{m_A}{T_b}} \left[\frac{\exp\left(\frac{h\nu_{ij}}{k_B T_{\text{СМВ}}}\right) - \exp\left(\frac{h\nu_{ij}}{k_B T_{\text{ex}}}\right)}{\exp\left(\frac{h\nu_{ij}}{k_B T_{\text{СМВ}}}\right) - 1} \right] r_h$$

Світіння одиночного гало в лініях обертання молекул H_2 і HD з'являється після точки повороту збурення насіння, коли стає помітним адіабатичне нагрівання баріонної речовини і зникає до реіонізації водню внутрішньо гало-середовища, викликаної фотодисоціацією молекул. Утворилось плато з різкими

підйомами і спусками. Їх виявлення може бути дуже інформативним про перші гало, перші молекули і перше світло.

Тимчасова залежність світіння одного гало в обертальних лініях молекулярних іонів HeH^+ має три фази різких змін: зростаючу після поворотної точки збурення насіння, зменшується під час Космічного світанку, викликану фотодисоціацією молекул у разі теплового гало або зіткненням в разі гарячого ореолу і помітним збільшенням при реіонізації. Таким чином, гало могло проявляти люмінесценцію в епоху реіонізації тільки в обертальних лініях молекулярних іонів HeH^+ [8].

Основний висновок про їх граничної можливості виявлення сучасними і планованими телескопами збігається з висновками цих та інших авторів. Новим результатом, представленим в відповідних роботах, є люмінесценція молекул H_2 і HD в лініях задовго до реіонізації атомарного водню і їх зникнення через фотодисоціацію цих молекул незадовго до цього [9].

І відповідно можна дійти до висновку, що щільність числа атомів водню, кінетична температура і поле випромінювання в міжпротогалактичному середовищі «Космічного світанку» такі, що атоми перебувають переважно в базовому стані. Теплове випромінювання з температурою $T_{fl} = 5000\text{K}$ і коефіцієнтом розведення, який іонізує атомарний водень до $x_{\text{HII}} = 0,5$ при $6 \leq z \leq 8$ [5]. Перше світло нагріває баріонний газ у міжпротогалактичному середовищі до десятків або сотень кельвінів при z_{rei} , що залежить від температури його випромінювання та коефіцієнта розведення. Щільність числа негативних іонів водню H^- і молекулярних іонів H починає зменшуватися задовго до реіонізації [10], оскільки порогові значення енергії фотодисоціації для них істотно нижче, ніж потенціал іонізації атомарного водню [11].

Головними для нас в контексті перевірки коректності роботи CLOUDY будуть висновки, що найпоширеніші молекули в Темні віків, а саме H_2 і HD, руйнуються протягом «Космічного світанку» незадовго до реіонізації водню, оскільки поріг фотодисоціації для них нижче, ніж потенціал іонізації атомарного водню і відповідно тимчасова залежність світіння одного гало верхнього капелюха в лініях обертання молекул H_2 і HD має вигляд плато з різким підйомом і спуском і максимальною амплітудою температури диференціальної яскравості. Початок плато пов'язано з формуванням і адіабатичним нагріванням формується гало, в той час як закінчення плато викликано фотодисоціацією молекул перед реіонізацією. Це допоможе нам краще зрозуміти динаміку нуклеосинтезу легких молекул в часи Темних віків

та Космічного світанку і в подальшому буде надзвичайно важливим при аналізі результатів виконання коду CLOUDY.

Розділ 2. Перевірка коректності застосування CLOUDY для моделювання еволюції вмісту перших молекул

2.1 CLOUDY

В своїй роботі ми плануємо досліджувати коректність застосування програми CLOUDY для симуляції еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті. Нуклеосинтез є ключовим процесом у формуванні молекулярної речовини у ранніх стадіях Всесвіту.

Важливо розуміти, що CLOUDY – це широковідома програма, що використовується для аналізу та моделювання фізичних властивостей і спектрів різних астрономічних середовищ (галактик, планетарних туманностей, газових хмар, космічного випромінювання, тощо).

CLOUDY базується на фізиці міжзоряного середовища, який використовує приближення рівноваги між різними хімічними реакціями та іонізацією. Під час розрахунку програма враховує різноманітні фактори, такі як густоту та температуру газу, наявність різних хімічних елементів, структуру та форму об'єкта, а також взаємодію з іншими об'єктами та космічним випромінюванням[12].

Застосування CLOUDY включає в себе розуміння механізмів фотоіонізації та взаємодії газу та пилу з космічним випромінюванням. Це може допомогти в розумінні фізики планетарних туманностей, галактик з активним ядром та інших об'єктів. Крім того, CLOUDY може допомогти в плануванні спостережень, оцінці якості спектрів та встановленні характеристик об'єктів на основі аналізу їх спектрів.

Загалом, CLOUDY є потужним та універсальним інструментом для моделювання різноманітних космічних об'єктів та дослідження різноманітних процесів, які відбуваються в них. Він дозволяє досліджувати та аналізувати взаємодію газів та фотонів, що важливо для розуміння еволюції галактик, зорі та космічних хмар.

У документації цієї програми відзначено можливість застосування цієї програми і для космологічних симуляцій для нестационарних моделей Всесвіту. Ми вирішили здійснити перевірку коректності застосування програми CLOUDY (версій 17.02 та 22.01), які передбачають симуляцію еволюції іонного та молекулярного вмісту у Всесвіті у вищезгадані епохи через порівняння її результатів з даними, отриманими програмою розрахованих у статті.

Тепер, коли ми вже знаємо, що таке програма CLOUDY та як її використовувати, можна перейти до детальнішого опису теоретичних основ, на яких базується ця програма. Для розуміння теорії, що стоїть за CLOUDY, важливо мати базові знання з астрофізики, зокрема з фізики розповсюдження світла в різних середовищах та взаємодії електронів з іонами та молекулами. Основні рівняння, які використовуються в CLOUDY, базуються на теорії статистичної фізики та кінетиці газів. Наприклад, для опису розповсюдження світла в середовищі використовуються рівняння переносу випромінювання, а для опису структури та термодинамічного стану середовища - рівняння рівноваги та збереження маси та енергії.

Для правильної інтерпретації результатів, отриманих з CLOUDY, також важливо розуміти термінологію та нотації, що використовуються в програмі. Наприклад, у CLOUDY значення відношення кількості певного хімічного елемента до кількості водню у середовищі виражається через логарифмічний параметр $\log(n(X)/n(H))$, де $n(X)$ та $n(H)$ - кількості атомів елементу X та водню H в одиниці об'єму середовища. Також в CLOUDY використовується система одиниць CGS, тому важливо знати, які фізичні величини входять до системи CGS та які одиниці їх вимірювання[12].

Космологічні моделі описують еволюцію Всесвіту в часі та просторі, від початку його існування до сьогодення. Вони базуються на гравітаційному взаємодії матерії та енергії, яка визначає структуру Всесвіту. Ці моделі містять ряд параметрів, таких як густина та склад Всесвіту, що впливають на його еволюцію.

Теорія газодинаміки описує рух газів, що заповнюють Всесвіт. Вона базується на законах збереження маси, енергії та кількості руху, а також на рівняннях стану газу. В теорії газодинаміки важливою є роль процесів, що відбуваються в газі, таких як іонізація, рекомбінація, збурення та інші, які впливають на еволюцію газу.

Для моделювання іонного та молекулярного вмісту Всесвіту в епохи Темних віків та Космічного світанку, потрібно використовувати космологічні моделі та теорію газодинаміки. Зокрема, для розрахунку вмісту іонів та молекул в газі необхідно знати розподіл густини, температури та складу газу в просторі.

CLOUDY розроблений для моделювання середовищ, що варіюються від низької густини до строгої термодинамічної рівноваги. Зрештою, всі ізоелектронні послідовності будуть розглядатися як багаторівневий атом плюс континуум[12].

Коефіцієнт відхилення - це співвідношення фактичного населеність стану до населення у термодинамічному рівновазі. Вони корисні, оскільки дозволяють безпосередньо порівнювати населеність його асимптотичним рівноважним лімітом.

Відносна густина населеності LTE для рівня n наведена нижче[13]:

$$\begin{aligned} P_n^* &= \frac{n_n^*}{n_e n_{ion}} = \frac{g_n}{g_e g_{ion}} \left(\frac{m_n^*}{m_e m_{ion}} \frac{h^2}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp(+\chi_n) \\ &\approx \frac{g_n}{g_e g_{ion}} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e kT} \right)^{3/2} \exp(+\chi_n) [\text{cm}^3] \\ &= \frac{g_n}{g_e g_{ion}} 4.1412957 \times 10^{-16} T^{-3/2} \exp(+\chi_n) \end{aligned}$$

де електронна статистична вага $g = 2$, іонні статистичні ваги - 1 та 2 для H-подібних та He-подібних видів, всі ядерні статистичні ваги ігноруються; а $g_n = 2n^2$ - це статистична вага гідрогенного рівня n . n_n^* - це населеність LTE рівня n [cm^{-3}], інші ж символи мають своє звичайне значення. Отже тут для[13]:

$$\chi_n = \frac{I_n}{kT} = \frac{15.7807 \times 10^4 Z^2}{n^2 T},$$

де I_n - це іонний поріг для рівня n , а Z - ядерний заряд. Безрозмірні коефіцієнти відхилення пов'язані з відносною густиною населеності LTE таким чином[13]:

$$b_n = \frac{n_n}{P_n^* n_e n_{ion}},$$

де n_n - фактичне населення рівня.
Швидкості рекомбінації та охолодження

Для температурного діапазону $2,8 \text{ K} \leq T \leq 1,001 \times 10^{10} \text{ K}$ потрібні коефіцієнти радіаційної рекомбінації та охолодження радіаційної рекомбінації для конкретного стану. Тут описано методи та припущення, що використовуються для отримання цих коефіцієнтів для іонів з гідрогеноподібною будовою[12].

Вираз Мілна для коефіцієнта радіаційної рекомбінації до рівня n може бути записаний як[13]:

$$\alpha_n(T) = \left(\frac{2\pi m_e k}{h^2}\right)^{-\frac{3}{2}} \frac{8\pi}{c^2} \frac{g_n}{g_e g_{ion}} T^{-\frac{3}{2}} \int_{hv_o}^{\infty} v^2 \alpha_v(n) \exp\left(-\frac{h(v - v_o)}{kT}\right) dv$$

$$= 4.12373 \times 10^{11} \frac{g_g}{g_e g_{ion}} T^{-\frac{3}{2}} \int_{hv_o}^{\infty} v_{Ryd} \alpha_v(n) \exp\left(-\frac{h(v - v_o)}{kT}\right) dv_{Ryd}$$

де g - це статистичні ваги складових, hv_{Ryd} - енергія фотона у Ридбергах, $hv_o \sim z^2/n^2$ - іонний потенціал у Ридбергах, $\alpha_v(n)$ - переріз фотоелектричного іонізування, а інші символи мають своє звичайне значення.

При реалізації цього формалізму був явно врахований той факт, що для самого водню енергетична шкала зсувається на відношення приведеної маси ядра до нескінченної маси. Якщо енергія рівня n водню дорівнює $n^{-2}R_H$, тоді температура, що відповідає 1 Ридбергу, що з'являється в експоненціальній, дорівнює 157807 К, а не зазвичай цитовані 157890 К. Це трохи впливає на результати, оскільки енергетична шкала входить як експоненту в попередньому рівнянні. Поперечні перерізи водневої фотоіонізації потрібні в дуже широкому діапазоні енергії, оскільки потрібні коефіцієнти рекомбінації в широкому діапазоні температур[12].

Точність результатів зазвичай перевищує 0,1 відсотка

Коефіцієнт швидкості рекомбінаційного охолодження (cm^3s^{-3}) визначається як[12]:

$$kT\beta(t, n) = \left(\frac{2\pi m_e k}{h^2}\right)^{-3/2} \frac{8\pi}{c^2} \frac{g_n}{g_e g_{ion}} T^{-3/2} \int_{hv_o}^{\infty} v^2 \alpha_v(n) h(v - v_o) \exp(-h(v - v_o)/kT) dv$$

Рівняння швидкості випромінювання[12]

Швидкість фотоіонізації (s^{-1}) визначається як:

$$\Gamma_n = 4\pi \int_{v_o}^{\infty} \frac{J_v}{hv} \alpha_v dv [\text{s}^{-1}]$$

і коефіцієнт швидкості індукованої рекомбінації як:

$$\alpha(\text{ind}) = P_n^* 4\pi \int_{v_o}^{\infty} \frac{J_v}{hv} \alpha_v \exp(-hv/kT) dv [\text{cm}^3\text{s}^{-1}]$$

Повний набір рівнянь радіаційного балансу можна записати як[12]:

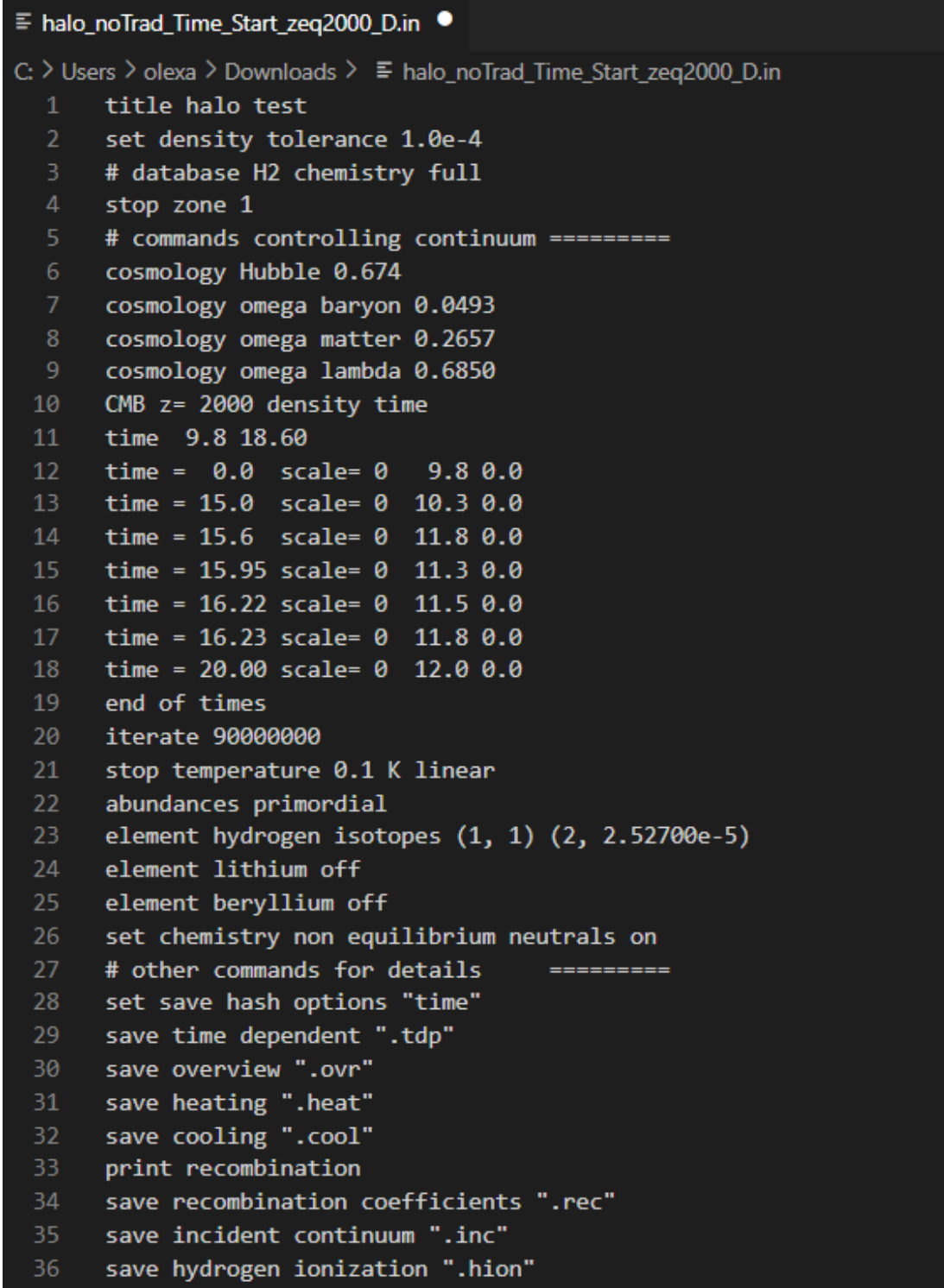
$$\frac{db_n}{dt} = \sum_l \frac{P_l^*}{P_n^*} b_l A_{n,l} \frac{g_n}{g_l} \eta_{n,l} \gamma_{n,l} + \sum_u \frac{P_u^*}{P_n^*} b_u (A_{u,n} P_{u,n} + A_{u,n} \eta_{u,n} \gamma_{u,n}) +$$

$$[\alpha(\text{rad}) + \alpha(\text{ind})] / P_n^* -$$

$$b_n \left(\sum_l (A_{n,l} P_{n,l} + A_{n,l} \eta_{n,l} \gamma_{n,l}) + \sum_u A_{u,n} \frac{g_u}{g_n} \eta_{u,n} \gamma_{u,n} + \Gamma_n \right)$$

2.2 Підготовка та попередні кроки для моделювання

В моєму дослідженні я буду використовувати однаковий вхідний файл для всіх версій CLOUDY для того щоб справедливо перевірити коректність його застосування. Для цього важливо розуміти що означають команди і як їх правильно застосовувати.



```

halo_noTrad_Time_Start_zeq2000_D.in
C: > Users > olexa > Downloads > halo_noTrad_Time_Start_zeq2000_D.in
 1  title halo test
 2  set density tolerance 1.0e-4
 3  # database H2 chemistry full
 4  stop zone 1
 5  # commands controlling continuum =====
 6  cosmology Hubble 0.674
 7  cosmology omega baryon 0.0493
 8  cosmology omega matter 0.2657
 9  cosmology omega lambda 0.6850
10  CMB z= 2000 density time
11  time 9.8 18.60
12  time = 0.0 scale= 0 9.8 0.0
13  time = 15.0 scale= 0 10.3 0.0
14  time = 15.6 scale= 0 11.8 0.0
15  time = 15.95 scale= 0 11.3 0.0
16  time = 16.22 scale= 0 11.5 0.0
17  time = 16.23 scale= 0 11.8 0.0
18  time = 20.00 scale= 0 12.0 0.0
19  end of times
20  iterate 90000000
21  stop temperature 0.1 K linear
22  abundances primordial
23  element hydrogen isotopes (1, 1) (2, 2.52700e-5)
24  element lithium off
25  element beryllium off
26  set chemistry non equilibrium neutrals on
27  # other commands for details =====
28  set save hash options "time"
29  save time dependent ".tdp"
30  save overview ".ovr"
31  save heating ".heat"
32  save cooling ".cool"
33  print recombination
34  save recombination coefficients ".rec"
35  save incident continuum ".inc"
36  save hydrogen ionization ".hion"

```

Рис 1. Зображення вхідного файлу

Ось точний вигляд вхідного файлу. Всі команди можна умовно поділити на три блоки: початкові, контролюючі та команди виводу результату. Почнемо з першого блоку. Як бачимо перша команда **title** визначає назву нашої моделі, над якою ми працюватимемо. В свою чергу наступна команда **set density tolerance** відповідає за визначення максимальної відносної похибки збереження густини газової стадії для кожного елемента, дозволена для іонізації та молекулярного балансу. Команда **database H2 chemistry full** вибирає базу даних, яка буде використовуватися для моделювання хімії. У цьому випадку використовується база даних «H2 chemistry full». **Stop zone** – встановлює обмеження на кількість зон, які обчислюються на кожній ітерації. У нашому випадку обчислення буде зупинено після обчислення 1 зон[12].

Група команд **cosmology** є однією з найважливіших в моєму дослідженні. Розглянемо детальніше кожен з них. Загалом ця команда відповідає за залежність від часу рекомбінації раннього Всесвіту і вона має декілька опцій: **cosmology omega**, що відповідає за параметр Омега для; вона в свою чергу приймає ключові слова **baryon, matter, lambda**, що в свою чергу визначають параметри щільності, які описують склад Всесвіту: щільність баріонів, щільність матерії (включаючи темну матерію), та щільність темної енергії, відповідно. Ці параметри використовуються для опису історії розширення Всесвіту та його великомасштабної структури. І відповідно **cosmology Hubble** визначає параметр Габбла, що в свою чергу відповідає за швидкість розширення Всесвіту[12].

Наступна група команд **CMB** – команда генерує поле випромінювання чорного тіла в строгій термодинамічній рівновазі (тобто $T_{\text{color}} = T_u$, де T_u — температура щільності енергії). Необов'язковим аргументом є параметр червоного зміщення z . В нашому випадку: $z = 2000$. Температура чорного тіла визначена формулою: $T_{\text{CMB}} = T_o(1 + z)$, а поточна температура фону вважається $T_o = 2.725 \pm 0.002\text{K}$. Ця команда визначає як форму, так і інтенсивність поля випромінювання. Вона також може приймати параметри, що є корисними для наших розрахунків: **time** та **density** – що відповідають за залежність від часу рекомбінації еволюції всесвіту та щільність червоного зсуву, відповідно. Окрема команда **time** визначає початкову і кінцеву точку часового проміжку в якому виконуватимуться розрахунки і **scale** – відповідний аргумент, який відповідає за крок з яким ітеруватиме програма. І команда **end of times** вказує на завершення даного часового блоку[12].

Команда **iterate** визначає кількість кроків, які будуть виконуватись програмою для моделювання. А **stop temperature** задає кінцеву температуру моделі. Розрахунок буде зупинено, коли кінетична температура впаде нижче T_{low} , аргументу цієї команди. Аргумент інтерпретується як логарифм температури, якщо ≤ 10 , і як лінійна температура, якщо > 10 , або якщо, як в нашому випадку, з'являється ключове слово **linear**[12].

Наступна директива **abundances** – визначає поширеність певного елемента в моделюванні. В нашому випадку команда посилається на файл «primordial.abn» в якому ініціалізований масив з відповідними даними для деяких хімічних елементів. Наступною командою є **element** – що задає поширеність вказаного елемента в моделі та визначає відповідні ізотопи, які будуть використовуватись, або ж не включити елемент, якщо буде додано параметр **off**. Як можна побачити на відповідному рисунку ми використовуватимемо тільки ізотопи водню, а інші легкі атоми берилію та літію навмисне виключимо з моделювання. І остання з команд, що відповідають за керування розрахунками: **set chemistry non equilibrium neutrals** – йдеться про режим розрахунку, у якому нейтральні атоми не перебувають у стані термодинамічної рівноваги з іншими компонентами плазми. Такий режим розрахунку використовують для визначення властивостей плазми в умовах, коли процеси реакцій між компонентами не можуть дійти до стану рівноваги через низьку густину плазми або високу температуру[12].

Решта команд використовуються виключно для полегшення обробки результатів моделювання. Команда **save** вказує що і в якому файлі потрібно зберігати під час кожної ітерації: нагрівання, охолодження, рекомбінаційні коефіцієнти та результати іонізації водню і відповідно **print recombination** для того щоб вивести результати рекомбінації в консоль.

2.3 Аналіз коду CLOUDY

Важливо крім розуміння як працюють відповідні команди також знати як реалізовано це в коді. Хотілось би наголосити на деяких важливих(для наших моделювань) файлах. Це будуть: `cosmology.cpp`, `mole_species.cpp` та `deuterium.cpp`. Аналіз цієї області в коді допоможе нам зрозуміти як працює CLOUDY при космологічних моделюваннях та наптовхнути на усвідомлення, де може бути потенційна помилка в розрахунках.

Cosmology.cpp

В цьому файлі реалізована робота програми в контексті космології та її моделювання. Цей код є частиною програми Cloudy, яка використовується для моделювання фотоіонізаційних процесів у космосі. Цей конкретний файл містить дві функції: `GetHubbleFactor` та `GetDensity`. Функція `GetHubbleFactor` обчислює значення параметра Габбла для заданого значення червоного зміщення z . Параметр Габбла - це величина, яка визначає швидкість розширення Всесвіту. Значення параметра Габбла залежить від космологічних параметрів, таких як густина матерії та темної енергії.

Функція `GetDensity` обчислює густину космосу для заданого значення червоного зміщення z . Густина космосу - це величина, яка визначає кількість речовини у певному об'ємі простору. Значення густини космосу залежить від космологічних параметрів, таких як густина матерії та темної енергії. Параметр Габбла обчислюється за формулою[12]:

$$H(z) = H_0 * \sqrt{\frac{\omega_{\lambda} + \omega_{\text{matter}} * (1 + z)^3}{\omega_{\text{rad}} * (1 + z)^4 + \omega_k * (1 + z)^2}}$$

де H_0 - це поточне значення параметра Габбла, а ω_{λ} , ω_{matter} , ω_{rad} та ω_k - це космологічні параметри, які визначають відповідно частку темної енергії, темної матерії, випромінювання та кривизни простору.

І відповідно формула, яка використовується для обрахунку густини[12]:
 $\text{density} = 1.123e-5 f * (\text{cosmology.}\omega_{\text{baryon}} * \text{cosmology.h} * \text{cosmology.h}) / (1.f + 3.9715f * \text{cosmology.f}_{\text{He}}) * (1 + z)^3$,

де ω_{baryon} - це частка баріонної матерії у Всесвіті, h - це поточне значення параметра Габбла, а f_{He} - це частка гелію у Всесвіті.

Також варто наголосити на тому, що нами було модифіковано цей файл різні версії CLOUDY, щоб реалізувати роботу космології в CLOUDY з «першим світлом».

Deuterium.cpp

Файл `deuterium.cpp` містить деякі функції, які відповідають за обробку деяких аспектів дейтерію в програмі CLOUDY. Наприклад, функція `ScaleDensitiesDeuterium` змінює густину дейтерію на задане число. Функція `SetDeuteriumIonization` встановлює концентрації іонізованого та неіонізованого дейтерію. Функція `SetDeuteriumFractionation` встановлює фракцію дейтерію в газовому стані. Функція `InitDeuteriumIonization` ініціалізує концентрації іонізованого та неіонізованого дейтерію. Функція `updateXMolecules` оновлює концентрацію молекул дейтерію.

Mole_species.cpp

Файл `mole_species.cpp` містить реалізацію різних методів, які використовуються для обробки молекулярних даних в програмі CLOUDY. Цей файл містить велику кількість коду, який виконує різні функції, такі як ініціалізація реакцій молекул, оновлення коефіцієнтів швидкостей хімічних реакцій та іншого.

У загальному, цей файл має на меті забезпечити платформу для обробки молекулярних даних в програмі CLOUDY. Це досягається за допомогою реалізації ряду методів, які забезпечують правильну обробку даних та забезпечують коректну роботу програми.

Важливо наголосити, що нами було модифіковано більше файлів, які були потрібні при аналізі коректності моделювання нестационарної моделі Всесвіту, проте не всі ці зміни потребують обширного тлумачення, адже є допоміжними в перевірці коректності космології в CLOUDY різних версій.

2.4 Моделювання та аналіз результатів

Після отримання результатів від програми CLOUDY, ми стикаємось з великим обсягом даних, які потребують обробки та аналізу. Для візуалізації та порівняння отриманих результатів із теоретичними значеннями, які були розраховані у відповідній статті[5], ми використовуємо бібліотеку GNUPLOT. Це дозволяє нам побудувати графіки залежностей різних фізичних параметрів, що були виведені з програми CLOUDY. В результаті порівняння графіків з теоретичними значеннями, ми зможемо зробити висновки про коректність використання програми CLOUDY для наших досліджень.

Почнемо із залежності $\log(2H_2/H)$. Видно як застосунок показує некоректні результати вже на ранніх етапах Темних віків, так і далі розрахунки відрізняються від досліджень, хоча в кінці все ж виходить на плато.

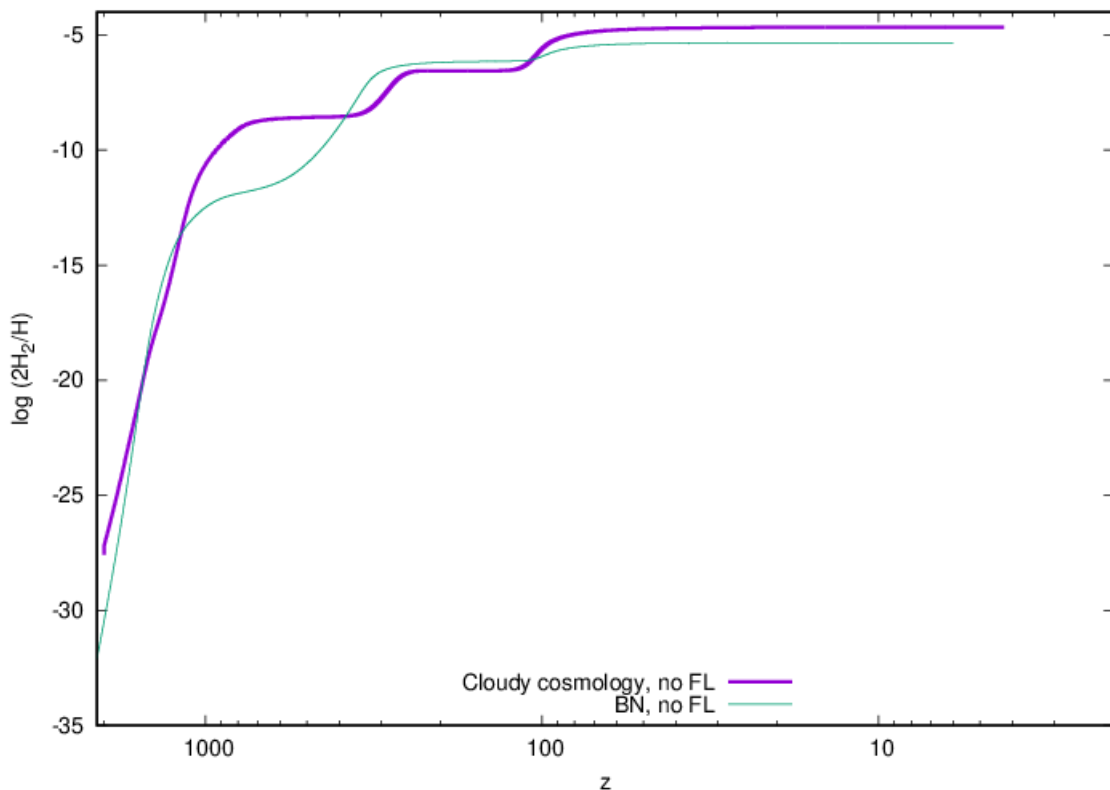


Рис 2. Залежність $\log(2H_2/H)$ по відповідному z

Далі йтиме залежність N^+/N , що показує аналогічні результати. Бачимо, що співвідношення в певний момент починає зростати, що є аномальним.

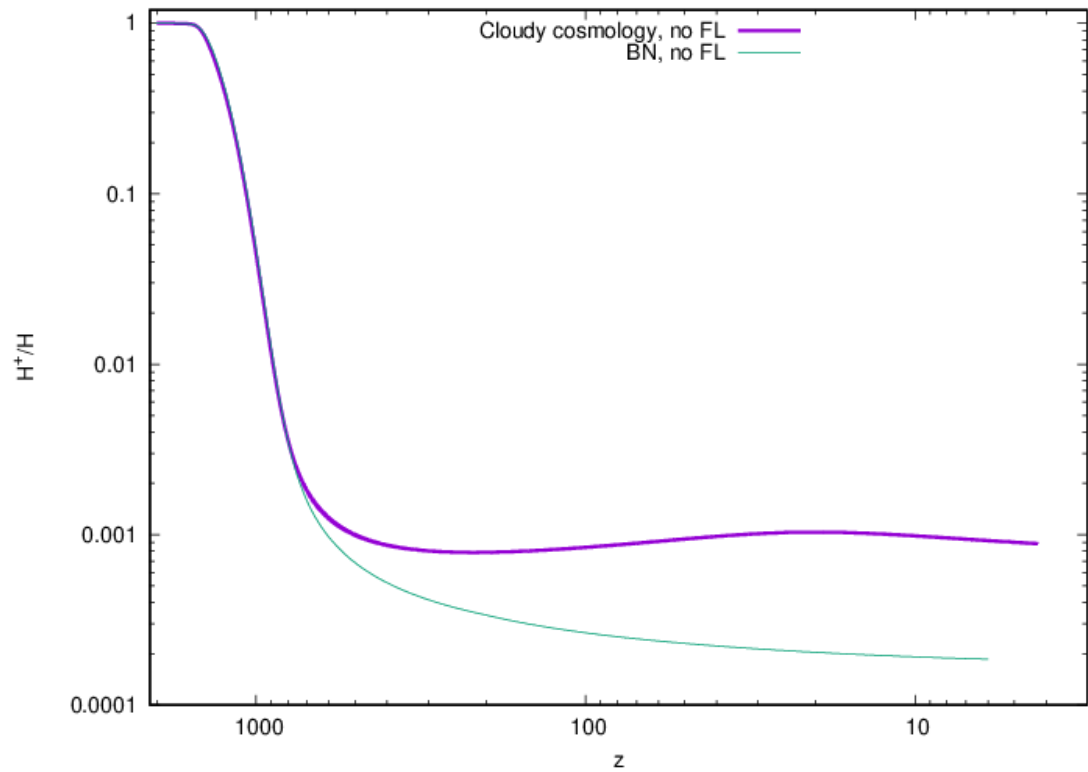


Рис 3. Залежність N^+/N по відповідному z

Залежності $n(D^0)$ та $n(D^+)$ в свою чергу ж показують, що початкові обрахунки є правильними та десь при $z = 800$ модель для дейтерію D^+ стає некоректною, відповідно до результатів досліджень.

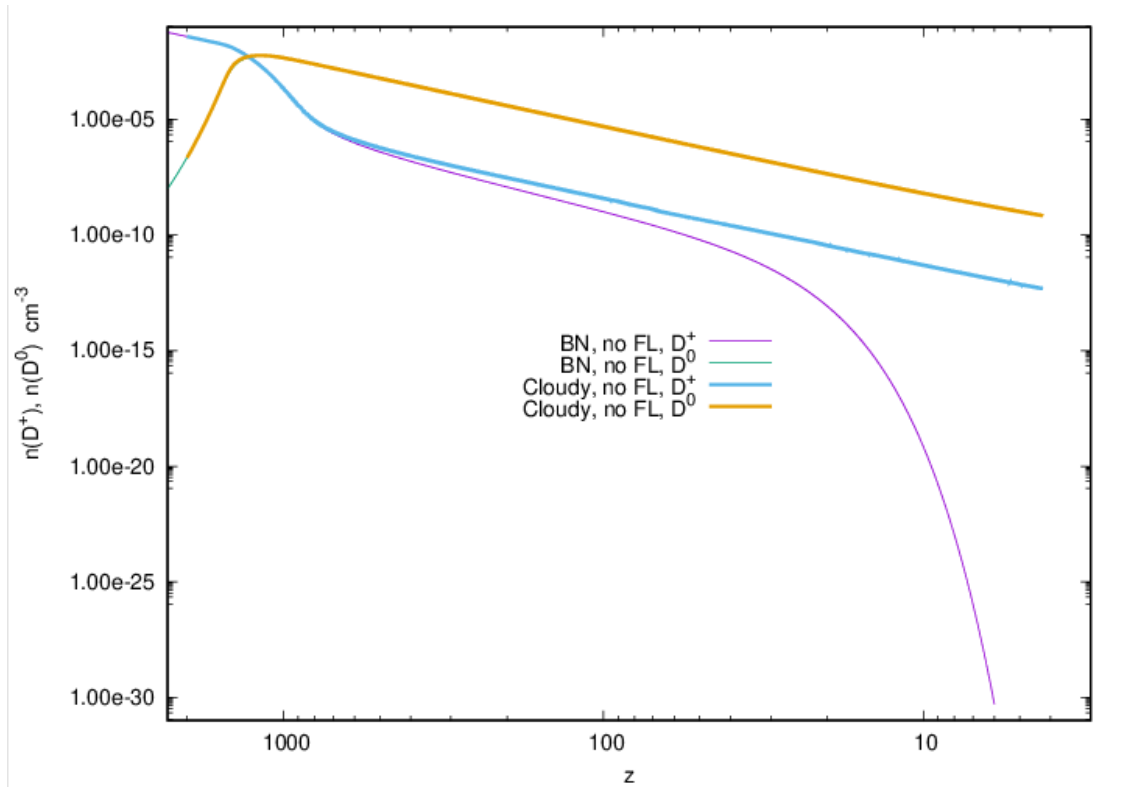


Рис 4. Залежність $n(D^0)$ та $n(D^+)$ по відповідному z

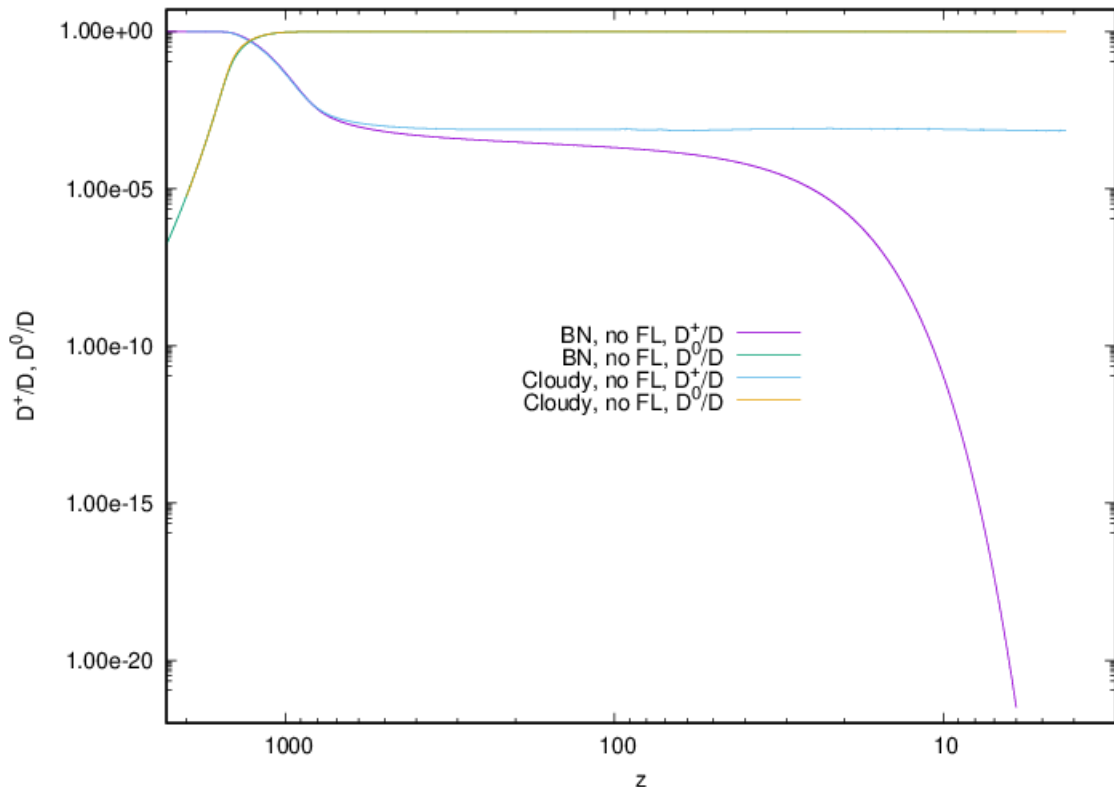


Рис 5. Залежності D^+/D та D^0/D по відповідному z

Залежності D^+/D та D^0/D показують аналогічні результати.

В результаті проведених досліджень з використанням програми CLOUDY та порівняння її результатів з розрахунками[5] для атомів H^+ , D^0 та D^+ ми отримали відмінності між графіками залежності відносної концентрації. Зокрема, графіки, отримані в результаті використання програми CLOUDY, мають іншу форму та мають більші значення в деяких точках порівняно з результатами[5].

Одним з можливих пояснень для цих відмінностей може бути використання різних моделей розрахунку фізичних процесів та властивостей атомів, що відображається в виборі різних параметрів у програмі CLOUDY та в розрахунках авторів[5].

Крім того, використання програми CLOUDY базується на певних припущеннях та наближеннях, які можуть не повністю відобразити реальний стан системи. Наприклад, в програмі CLOUDY використовується метод еквілібріуму, який ґрунтується на припущенні, що газ знаходиться в термодинамічній рівновазі, тоді як у реальному Всесвіті такий режим може не відбуватись.

Аналізуючи результати, отримані за допомогою коду CLOUDY для дейтерію, стало зрозуміло, що при наближенні до епохи Космічного Світанку

вміст дейтерію мав би переходити в молекули[5], але наші результати цього не підтверджують. Це може свідчити про некоректність розрахунків, які проводяться в програмі. Відповідні графіки залежностей показників поглинання та емісії містять значні відхилення від очікуваних значень.

Одна з можливих причин таких результатів може бути пов'язана з недостатньою точністю розрахунків відносно різних процесів, що відбуваються в системі дейтерію. Зокрема, деякі процеси, які враховуються в розрахунках, можуть бути недостатньо точно описані теоретичними моделями, що використовуються в програмі.

Також можливо, що в програмі не враховуються деякі важливі ефекти, які мають місце в системі дейтерію, наприклад, взаємодія дейтерію з іншими елементами Всесвіту. У такому випадку, для отримання більш точних результатів необхідно враховувати ці ефекти, що може бути важко зробити в рамках програми CLOUDY.

Таким чином, отримані результати свідчать про необхідність подальшого вдосконалення теоретичних моделей та програмного забезпечення для більш точного моделювання фізичних процесів, що відбуваються в космічному середовищі.

Отже, результати нашого дослідження показали, що використання програми CLOUDY для симуляції іонного та молекулярного вмісту у Всесвіті в епохи Темних віків та Космічного світанку потребує додаткових перевірок та корекцій, щоб забезпечити точність результатів.

Висновки

Ця праця досліджує точність прогнозування вмісту перших молекул у Всесвіті за допомогою програми CLOUDY, що є популярним інструментом для астрофізичних розрахунків.

Ми показуємо, як CLOUDY використовується для розрахунку вмісту перших молекул, зокрема, враховуючи вплив різних параметрів на результати. Ми також розглянемо альтернативні методи моделювання еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті та порівняємо їх результати з результатами, отриманими за допомогою програми CLOUDY. Ми провели серію чисельних експериментів, щоб дослідити вплив різних параметрів на формування та еволюцію молекулярних хмар у Всесвіті, таких як розмір та щільність, рівень збурення та температура.

Отримані результати показують, що програма CLOUDY не завжди добре працює для розрахунку вмісту перших молекул у Всесвіті. Проте, у нашій роботі ми детально проаналізуємо результати, отримані за допомогою програми CLOUDY, та покажемо, де і як ця програма може бути неточною. Все це дозволить нам зробити висновки щодо коректності застосування програми CLOUDY в подальших дослідженнях та визначити її обмеження.

Ця робота може бути корисною для астрофізиків, що цікавляться еволюцією перших молекул у Всесвіті та їх впливом на формування галактик і зірок.

Моделювання за допомогою програми CLOUDY зазвичай дають дуже важливі результати в астрофізиці. Проте, варто зазначити, що деякі фактори можуть впливати на точність результатів, такі як приближення та набір вхідних даних. Тому, незважаючи на те, що програма CLOUDY є чи не основним інструментом для досліджень та моделювань у галактичній та космічній астрофізиці, результати, отримані за її допомогою, потребують уважної перевірки та інтерпретації.

Список використаних джерел

1. Якібчук П. Фізичний факультет / П. Якібчук // Енциклопедія Львівського університету. Фізичний факультет. Факультет електроніки. Астрономічна обсерваторія. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2007. – С. 161–164.
2. Новосядлий Б. С. Структура й еволюція Всесвіту / Б. С. Новосядлий: навч. посібн. — Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2019. – 120 с.
3. R.J. Rutten. RADIATIVE TRANSFER IN STELLAR ATMOSPHERES – Sterrekundig Instituut Utrecht: Institute of Theoretical Astrophysics Oslo, 2003. – 120 с.
4. Андрієвський С. М. А659 Ядерна астрофізика: навчальний посібник/Андрієвський С. М., Кузьменков С. Г. – Одеса: Одеськ. нац. ун-т імені І.І. Мечникова, 2022. – 120 с.
5. V. Novosyadlyj, Yu. Kulinich, B. Melekh and V. Shulga The first molecules in the intergalactic medium and halos of the Dark Ages and Cosmic Daws / Novosyadlyj B. // Astronomy & Astrophysics.– 2022.– Vol.663.– с. 16
6. Kulinich, Yu. ; Novosyadlyj, B. ; Shulga, V. ; Han, W. Thermal and resonant emission of dark age halos in the rotational lines of HeH⁺ / Kulinich Yu. // Physical Review D.– 2020.– Vol.101.– с. 8
7. Dubrovich, V. K. Molecules of cosmological origin / Dubrovich, V. K. // Soviet Astronomy Letters.– 1977.– Vol.3.– с. 128, 129
8. Maio, Umberto ; Péroux, Céline ; Ciardi, Benedetta Atomic and molecular gas from the epoch of reionisation down to redshift / Umberto Maio // Astronomy & Astrophysics.– 2019.– Vol.657.– с. 23
9. Dubrovich, Viktor ; Bajkova, Anisa ; Khaikin, V. B. Spectral spatial fluctuations of CMBR: Strategy and concept of the experiment / Umberto Maio // New Astronomy.– 2008.– Vol.13.– с. 26
10. Novosyadlyj, B. ; Sergijenko, O. ; Shulga, V. M. Molecules in the early universe / Novosyadlyj B. // Kinematics and Physics of Celestial Bodies.– 2017.– Vol.33.– с. 255-264
11. Puy, D. ; Alecian, G. ; Le Bourlot, J.; Leorat, J. ; Pineau Des Forets, G. Formation of primordial molecules and thermal balance in the early universe / Puy, D. // Astronomy and Astrophysics.– 1993.– Vol.267.– с. 337-346
12. Hazy a brief introduction to CLOUDY C22 : в 3 т. – T1. 1. Introduction and commands -K. : Cloudy & Associates, 2022. – 342с.; T2. 2. Results, computational environment, and test suite -K. : Cloudy & Associates, 2022. – 531с.; T3. 3. Physics -K. : Cloudy & Associates, 2022. – 112с.
13. Ferland, G. J. search by orcid ; Peterson, B. M. ; Horne, K. ; Welsh, W. F. ; Nahar, S. N. Anisotropic Line Emission and the Geometry of the Broad-Line Region in Active Galactic Nuclei / Ferland, G. J. // Astrophysical Journal.– 1992.– Vol.387.– с. 95

Додатки

Додаток А

Таблиця хімічних реакцій

	Реакція		Реакція
(H1)	$H^+ + e^- \rightarrow H + \gamma$	(H ₂)	$H + \gamma \rightarrow H^+ + e^-$
(H3)	$H + e^- \rightarrow H^- + \gamma$	(H4)	$H^- + \gamma \rightarrow H + e^-$
(H5)	$H^- + H \rightarrow H_2 + e^-$	(H6)	$H^- + H^+ \rightarrow H_2^+ + e^-$
(H7)	$H^- + H^+ \rightarrow H + H$	(H8)	$H + H^+ \rightarrow H_2^+ + \gamma$
(H9)	$H_2^+ + \gamma \rightarrow H + H^+$	(H10)	$H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$
(H11)	$H_2^+ + e^- \rightarrow H + H$	(H12)	$H_2^+ + \gamma \rightarrow 2H^+ + e^-$
(H15)	$H_2 + H^+ \rightarrow H_2^+ + H$	(H18)	$H_2 + \gamma \rightarrow H_2^+ + e^-$
(H23)	$H_2 + \gamma \rightarrow H + H$		
(D1)	$D^+ + e^- \rightarrow D + \gamma$	(D2)	$D + \gamma \rightarrow D^+ + e^-$
(D3)	$D + H^+ \rightarrow D^+ + H$	(D4)	$D^+ + H \rightarrow D + H^+$
(D8)	$D^+ + H_2 \rightarrow H^+ + HD$	(D10)	$HD + H^+ \rightarrow H_2 + D^+$
(D25)	$HD + \gamma \rightarrow D + H$		
(He1)	$He^{++} + e^- \rightarrow He^+ + \gamma$	(He2)	$He^+ + \gamma \rightarrow He^{++} + e^-$
(He3)	$He^+ + e^- \rightarrow He + \gamma$	(He4)	$He + \gamma \rightarrow He^+ + e^-$
(He8)	$He + H^+ \rightarrow HeH^+ + \gamma$	(He10)	$He^+ + H \rightarrow HeH^+ + \gamma$
(He11)	$HeH^+ + H \rightarrow He + H_2^+$	(He12)	$HeH^+ + e^- \rightarrow He + H$
(He14)	$HeH^+ + \gamma \rightarrow He + H^+$	(He15)	$HeH^+ + \nu \rightarrow He^+ + H$