

报告正文

参照以下提纲撰写，要求内容翔实、清晰，层次分明，标题突出。
请勿删除或改动下述提纲标题及括号中的文字。

（一）立项依据与研究内容（建议 8000 字以内）：

1. 项目的立项依据（研究意义、国内外研究现状及发展动态分析，需结合科学研究发展趋势来论述科学意义；或结合国民经济和社会发展中迫切需要解决的关键科技问题来论述其应用前景。附主要参考文献目录）：

恒星形成区是连接分子云和原始行星盘之间的一个重要演化阶段，在揭示星际复杂有机分子的起源和演化方面具有重要的作用。目前，恒星形成区中的复杂有机分子（Herbst et al. 2009）及其起源与演化已经得到了越来越多的关注，已经在各种各样的物理环境中探测到了复杂有机分子的存在，比如小质量恒星形成区（Yang et al. 2021），中等质量恒星形成区（Coletta et al. 2020），大质量恒星形成区（Qin et al. 2022），具有外流或激波活动的区域（De Simone et al. 2020; Bianchi et al. 2022）等。不仅如此，在恒星形成之前和之后的演化阶段中，即致密分子云和原始行星盘阶段，也发现了复杂有机分子的存在（Agundez et al. 2021; Brunken et al. 2022）。这说明复杂有机分子的合成可以发生在一个较大的时间尺度和参数空间内。恒星形成区是目前探测和研究复杂有机分子最多的环境之一，为复杂有机分子在星际环境下的起源和演化提供了重要的参考样本；而多样的恒星形成区的物理环境也提供了丰富的样本选择空间。

由于复杂有机分子的合成可以发生在一个较大的参数空间范围内，这使得复杂有机分子的化学演化特征在恒星形成区中表现出丰富的差异性和多样性。下图 1 展示了多种类型的复杂有机分子在不同的热核环境中柱密度的对比（Peng et al. 2022）。其中 MM4 至 MM11 为大质量恒星形成区 G9.62+0.19 中处于 4 种不同演化阶段的热核，Orion KL(HC)和 Orion KL(CR)分别为猎户座大质量恒星形成区中的热核（Hot Core）和致密脊区域（Compact Ridge）。可以看出，在不同的恒星形成区，以及同一恒星形成区中不同演化阶段的环境下，复杂有机分子的化学演化都表现出了极大的差异。大质量恒星形成区中复杂的物理过程和恒星形成活动对复杂有机分子的化学演化具有直接的影响，热核会根据自身或周围环境的不同表现出或丰富或贫乏的复杂有机分子特征。另一方面，对高空

间分辨率的小质量恒星形成区中复杂有机分子的统计分析表明，复杂有机分子的空间分布具有两种成分，即延展的、冷包层中的复杂有机分子和致密的、温热气体中的复杂有机分子（van Gelder et al. 2020）。这说明恒星形成区中的复杂有机分子可以追溯到更早期的星前核阶段。更进一步地，对多种类型的复杂有机分子的对比分析表明，某些类型的复杂有机分子会在各类源中表现出一致的丰度比，说明它们可能具有某种化学相关性（Coletta et al. 2020; van Gelder et al. 2020）；而另外一些类型的复杂有机分子，特别是含氮的和含氧的复杂有机分子之间，则存在着不同空间位置或具体物理环境上的差异，称为化学分化现象（chemical differentiation; Nazari et al. 2021; Qin et al. 2022）。目前对恒星形成区中复杂有机分子的化学相关性和化学分化现象的研究是一个热门的方向，对于它们的本质和成因还需要更深入的探究。

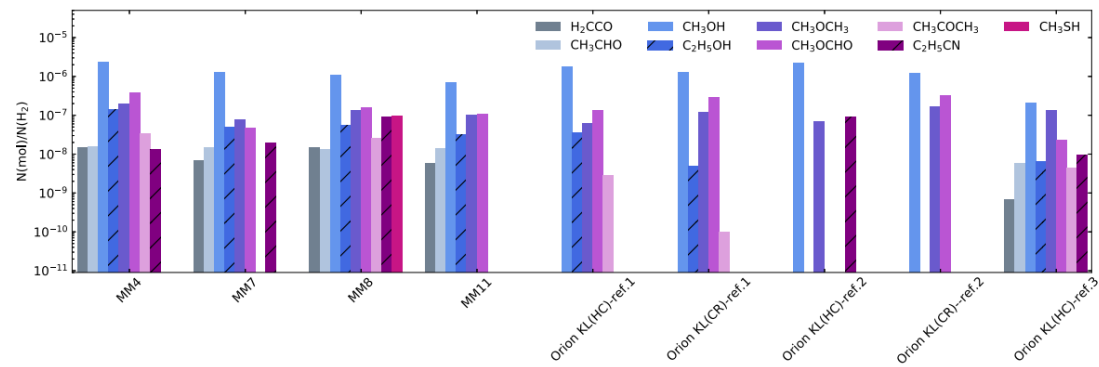


图 1 热核中检测到的一些复杂有机分子，及它们的柱密度在各类源之间的对比。图片来源: Peng et al. 2022。

复杂有机分子在不同环境中表现出的差异性和多样性源于多方面的因素。比如，分子本身的化学特性、合成/分解反应路径的不同、对物理参数所表现出来的敏感性等的内在因素，以及外界恒星形成区所处的物理演化阶段、恒星形成活动与反馈等的外在因素。最简单的复杂有机分子之一，甲醇（Methanol），广泛存在于分子云和恒星形成区中（Soma et al. 2018; Qin et al. 2022）。而比甲醇更复杂的分子也是观测者的重要研究对象。下图 2 中的左图展示了两个复杂有机分子，即甲酸甲酯（CH₃OCHO, Methyl Formate, MF）与二甲醚（CH₃OCH₃, Dimethyl Ether, DE）的丰度比，在各种不同的演化状态下的星际介质中的变化趋势（Coletta et al. 2020）。可以看出，两者的丰度比都在 1 附近，而且在各种不同的演化状态下基本都保持着这样的比例。这也许说明，甲酸甲酯和二甲醚的化学演化具有某种相关性，即它们可能是由共同的前体分子产生的。主流的观点认为复杂有机分子主要在星前核阶段的尘埃上合成，然后在恒星形成过程中由

于环境温度的升高，使尘埃上的复杂有机分子解吸到了气相。这也就意味着，复杂有机分子具有单一的起源模式（即在尘埃冰中），因此具有一致的丰度比。目前的一些观测和理论研究支持这种观点，认为从恒星形成区到原始行星盘乃至到彗星中的复杂有机分子都可能起源于恒星形成之前的演化阶段，即分子云或者星前核阶段（Quenard et al. 2018; Coletta et al. 2020; van Gelder et al. 2020）。同时也有一些观点认为恒星形成区的一些本地环境也会影响复杂有机分子的合成，比如不同质量的热核（Rivilla et al. 2017），或者发生吸积过程的热核（Baek et al. 2022）等。目前比较统一的观点认为，恒星形成区中的复杂有机分子起源于分子云或星前核阶段的尘埃冰上，因此具有一致的丰度比，而具体物理环境的差异又导致了同一演化阶段丰度比的变化（Nazari et al. 2022）。

然而，恒星形成区物理条件的多样性为理解复杂有机分子的起源和演化带来了挑战。下图 2 中的右图清晰地展示了大质量恒星形成区 G10.6-0.4 中甲酸甲酯和二甲醚之间的双模态相关性（bimodal correlation）。当温度大于 ~ 270 K 时，甲酸甲酯与二甲醚的柱密度比不再接近于 1，而是远远大于 1，这也许意味着存在着未知的反应过程，或者有多种物理化学因素都在发挥着作用，比如低温、高温环境下的气相化学、冰化学等。除了认为复杂有机分子可能起源于尘埃上之外，也有理论计算表明，复杂有机分子可以在气相中生成，特别是在低温的条件下通过气相化学反应合成（Balucani et al. 2015）。这也就意味着不能排除其它的合成途径或化学过程，特别是对于热核中的复杂有机分子，原因是因为温热的环境可能会更加促进复杂有机分子的合成速率。总之，关于复杂有机分子的合成和起源环境仍然是一个有待解决和深入探索的问题。

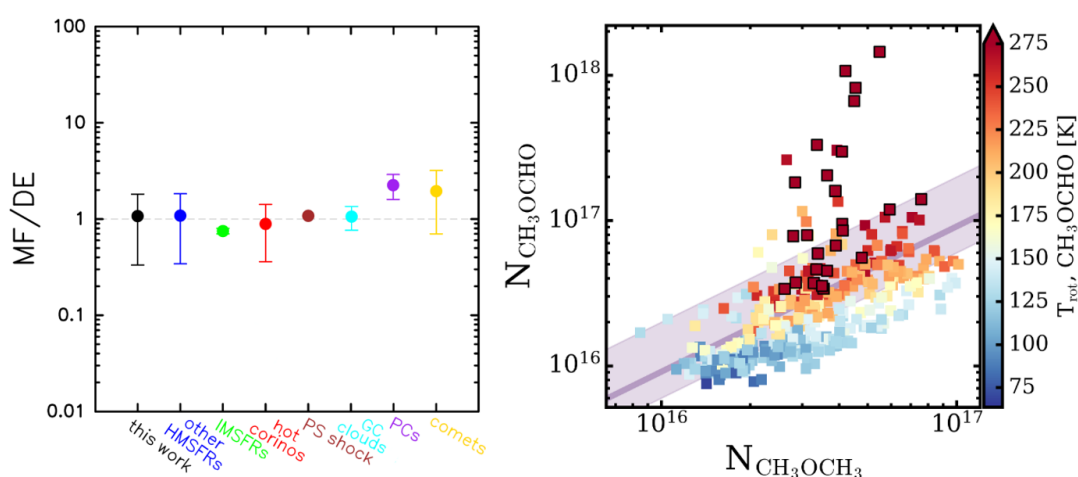


图 2 左图: 甲酸甲酯 (CH_3OCHO , Methyl Formate, MF) 与二甲醚 (CH_3OCH_3 , Dimethyl Ether, DE) 的丰度比在各种不同的天文源中的对比，其中“HMSFRs”为大质量恒星形成区，“IMSFRs”为中等质量恒星形成区，“PS shock”为原恒星激波区，“GC clouds”为银心中的分子云，“PCs”

为星前核。右图：大质量恒星形成区 G10.6-0.4 中不同空间位置下的甲酸甲酯与二甲醚的柱密度对比，其中紫色的实线为 $Y=X$ ，阴影为其它文献中的测量，不同的颜色表示不同的旋转温度。

左图来源：Coletta et al. 2020，右图来源：Law et al. 2021。

为了理解复杂有机分子之间的化学关联，以及各种化学过程之间的相互作用，细致而全面的天体化学模拟是必不可少的。目前关于热核或温热核的天体化学模型已经成熟（Garrod et al. 2006; Garrod 2013）。虽然不能完全复现特定环境下某些复杂有机分子的丰度，但是天体化学模型可以成功地解释大多数恒星形成区中观测到的复杂有机分子（Chen et al. 2023），并且更重要的是可以对复杂有机分子的起源给出理论的解释，以及从分子的化学特性、反应的合成和分解途径等这种最根本的方式来考察复杂有机分子在恒星形成区中所表现出来的差异性和多样性。复杂有机分子的多样性与分子的扩散能、解吸能、以及合成路径等多种因素有关。各种恒星形成区所处的物理环境的不同又导致了观测到的复杂有机分子之间的差异性。下图 3 展示了在热核条件下的天体化学模型结果（Garrod 2013），其中实线为复杂有机分子在气相中的丰度，虚线为该分子在尘埃表面的丰度。可以看到，在演化的早期阶段，热核的温度还只是在几十 K 的时候，复杂有机分子首先会在尘埃表面合成，当温度升高到上百 K 的时候，尘埃上的复杂有机分子开始解吸到气相中，从而被探测到。不同分子由于解吸能的不同，使得它们在不同的温度下被依次解吸到气相，又由于它们的合成和分解路径及反应速率的不同，最终使得它们的演化变得千差万别。

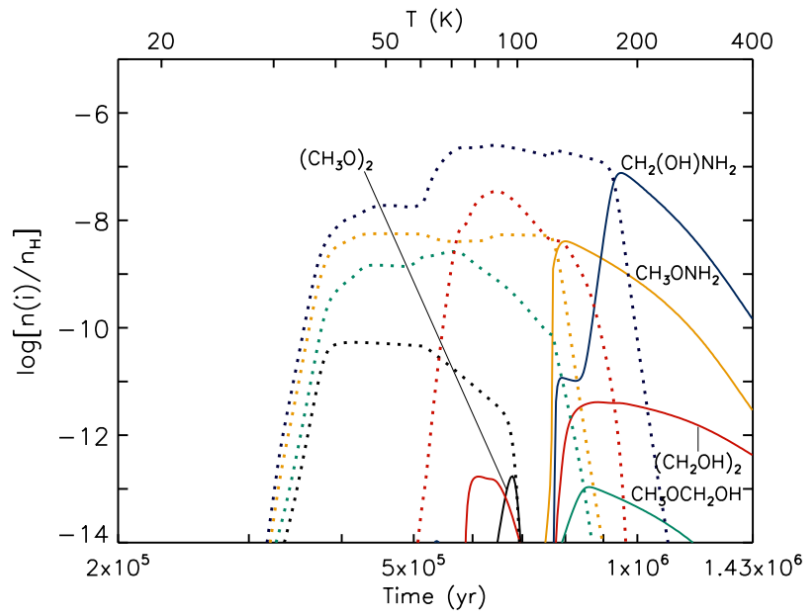


图 3 热核中复杂有机分子的丰度随着时间和温度的演化，其中实线为该分子在气相中的丰度，虚线为该分子在尘埃表面的丰度。图片来源：Garrod 2013。

相比于对恒星形成区中复杂有机分子的大样本观测研究,目前还没有一个大样本的模型从参数空间上对恒星形成区中的复杂有机分子进行统计分析和研究。而且,由于观测对象的不确定性¹及实际物理过程的复杂性,使得大样本观测研究中得到的统计特征可能包含了多种潜在的制约因素而无法进行区分(Nazari et al. 2022)。因此,通过大样本的天体化学模型,对恒星形成区中多种可能的参数空间进行模拟,得到一个具有初值确定、过程明确的模拟样本,继而对该样本进行多方位的统计分析,并与观测数据进行比较,从而可以对恒星形成区中复杂有机分子的化学演化形成一个更本质的认识。

参考文献

- Agundez M., Marcelino N., Tercero B., Cabezas C., de Vicente P., Cernicharo J., 2021, *A&A*, 649, L4
- Baek G., Lee J.-E., Hirota T., Kim K.-T., Kyoung Kim M., 2022, *ApJ*, 939, 84
- Balucani, N., Ceccarelli, C., & Taquet, V. 2015, *MNRAS*, 449, L16
- Bianchi E., Lopez-Sepulcre A., Ceccarelli C., Codella C., Podio L., Bouvier M., Enrique-Romero J., 2022, *ApJL*, 928, L3
- Brunken N. G. C., Booth A. S., Leemker M., Nazari P., van der Marel N., van Dishoeck E. F., 2022, *A&A*, 659, A29
- Chen Y., van Gelder M. L., Nazari P., Brogan C. L., van Dishoeck E. F., Linnartz H., Jorgensen J. K., et al., 2023, *A&A*, 678, A137
- Coletta A., Fontani F., Rivilla V. M., Mininni C., Colzi L., Sanchez-Monge A., Beltran M. T., 2020, *A&A*, 641, A54
- De Simone M., Codella C., Ceccarelli C., Lopez-Sepulcre A., Witzel A., Neri R., Balucani N., et al., 2020, *A&A*, 640, A75
- Garrod R. T., Herbst E., 2006, *A&A*, 457, 927
- Garrod R. T., 2013, *ApJ*, 765, 60
- Herbst E., van Dishoeck E. F., 2009, *ARA&A*, 47, 427
- Law C. J., Zhang Q., Oberg K. I., Galvan-Madrid R., Keto E., Liu H. B., Ho P. T. P., 2021, *ApJ*, 909, 214
- Nazari P., Meijerhof J. D., van Gelder M. L., Ahmadi A., van Dishoeck E. F., Tabone B., Langeroodi D., et al., 2022, *A&A*, 668, A109
- Nazari P., van Gelder M. L., van Dishoeck E. F., Tabone B., van't Hoff M. L. R.,

Ligterink N. F. W., Beuther H., et al., 2021, A&A, 650, A150

Peng Y., Liu T., Qin S.-L., Baug T., Liu H.-L., Wang K., Garay G., et al., 2022, MNRAS, 512, 4419

Qin S.-L., Liu T., Liu X., Goldsmith P. F., Li D., Zhang Q., Liu H.-L., et al., 2022, MNRAS, 511, 3463

Quenard D., Ilee J. D., Jimenez-Serra I., Forgan D. H., Hall C., Rice K., 2018, ApJ, 868, 9

Rivilla V. M., Beltran M. T., Cesaroni R., Fontani F., Codella C., Zhang Q., 2017, A&A, 598, A59

Soma T., Sakai N., Watanabe Y., Yamamoto S., 2018, ApJ, 854, 116

van Gelder M. L., Tabone B., Tychoniec L., van Dishoeck E. F., Beuther H., Boogert A. C. A., Caratti o Garatti A., et al., 2020, A&A, 639, A87

Yang Y.-L., Sakai N., Zhang Y., Murillo N. M., Zhang Z. E., Higuchi A. E., Zeng S., et al., 2021, ApJ, 910, 20

2. 项目的研究内容、研究目标, 以及拟解决的关键科学问题(此部分为重点阐述内容);

项目的研究内容

本项目将构建一个包含多个维度的样本数据库, 来覆盖致密分子云、恒星形成区等不同物理条件下的参数空间, 并通过天体化学模型, 对这个参数空间中的格点进行天体化学模拟, 得到复杂有机分子的丰度在这个参数空间中的取值, 最后通过统计分析的方法, 得到复杂有机分子的丰度、丰度比、相关矩阵等特征与样本中的变量之间的关系, 并与观测结果进行比较, 揭示复杂有机分子在恒星形成区中的化学演化规律。

因此, 本项目的具体研究内容分为以下三个方面:

第一: 构建一个多维度的、覆盖恒星形成区不同物理环境的参数空间样本

目前已有大量的对小质量恒星形成区、大质量恒星形成区等的观测研究, 并对源的物理条件有具体的限制, 比如源的尺度、质量、光度等。然而实际的天体化学模拟中并不需要这些物理参数作为模型的输入参量, 因此本项目所选取的参数变量主要包括密度、温度、演化时间、辐射场强度等。其中有些参数可以通过具有空间分辨率的恒星形成区的观测来给出, 因此代表了不同物理环境

下的恒星形成区，比如密度、温度等；另外一些参数虽然不能通过观测来直接给出限制，但对恒星形成区的化学演化具有重要的影响，比如演化时间等。这些参数会直接影响复杂有机分子的化学演化过程，因此作为本项目构建多维度样本的选取原则。

氢核的数密度不仅会影响分子云的物理演化时标，也会影响分子云的化学演化过程，同时也决定了分子云中其它元素分子的数目。氢核的数密度也会影响尘埃表面的冰层数，大部分的复杂有机分子是在冰里面合成的，从而影响复杂有机分子的化学。当分子云坍缩形成原恒星的时候，氢核的数密度会由于吸积过程升高。因此，样本中关于氢核数密度的选择主要分为两种，一种是初始氢核数密度，即分子云阶段的数密度；第二种为最终氢核数密度，即热核或温热核（hot corino）的氢核数密度。

温度对气相化学和尘埃表面化学具有重要而直接的影响，对具有空间分辨率的恒星形成区中的复杂有机分子观测表明，复杂有机分子具有复杂的空间分布特征，不同位置的复杂有机分子还具有不同的激发温度。热核或温热核中的原恒星会加热周围的气体，使它们的温度升高。因此，样本中关于温度的选择分为两种，第一种为初始温度，即分子云阶段的温度；第二种为最终温度，即由于热核的加热，在恒星形成区不同位置处的温度。

由于分子云和恒星形成区的演化时间的不确定性，样本中将考虑多种可能的演化时标。第一种为分子云的演化时标，即演化到恒星形成阶段的时候分子云的年龄；第二种为热核或温热核的加热时标。后者又分为三种情况，分别为快速加热时标、慢速加热时标、及中等时间尺度的加热时标。

最后，恒星形成区不是孤立存在的，一般会受到周围恒星形成活动影响。这种影响既包括对温度、密度的影响，也包括对辐射场强度的影响。因此，本项目样本中也考虑了包括对复杂有机分子化学演化有影响的 UV 辐射场强度、宇宙线电离率。

第二：格点化参数空间，构建天体化学模型，得到复杂有机分子在参数空间中的演化

当样本的变量选择确定后，对参数值进行格点化处理，构建一个参数空间，进而以参数空间中的格点作为输入参数，进行相应的天体化学模拟，得到复杂有机分子在这个格点条件下的取值，最终得到一个覆盖恒星形成区不同物理条件的、多种因素作用下的复杂有机分子化学演化状态的数据库。天体化学模拟及数据库的构建参见下节本项目的研究方案和可行性分析部分。

第三：对复杂有机分子在参数空间中的化学演化状态进行统计分析

通过上述得到的数据库，可以进行大样本的统计分析，研究复杂有机分子的丰度、丰度比、相关矩阵等在不同物理条件下的演化特征，并与观测数据进行交叉对比，解释观测现象。对于无法解释的观测现象，当需要引入新的物理机制或者化学机制的情形时，则反过来可以促进天体化学模型的发展。另外，观测研究者根据所研究的恒星形成区的条件，可以直接从数据库中查找对应的结果，而无需重复进行天体化学模拟。

项目的研究目标

- (1) 创建一个涵盖恒星形成区多维度的、不同物理条件参数空间的、多种复杂有机分子化学演化状态的数据库。
- (2) 探究复杂有机分子在恒星形成区中的演化规律，如甲酸甲酯、二甲醚等分子的丰度、丰度比、相关性等，及含氮、含氧类型的复杂有机分子在恒星形成区中表现出来的化学分化现象等。

拟解决的关键科学问题

- (1) 相比于对恒星形成区的大样本观测研究，目前还没有对应的大样本天体化学模型研究，本项目将构建一个覆盖恒星形成区各种物理条件的参数化网格空间，创建一个大大样本天体化学模型数据库。
- (2) 目前关于恒星形成区中复杂有机分子的合成和起源环境、丰度比、化学相关性、化学分化等还存在诸多疑难，通过创建的大样本天体化学模型数据库，试图寻找相关规律，并对观测现象进行解释。

3. 拟采取的研究方案及可行性分析(包括研究方法、技术路线、实验手段、关键技术等说明)；

研究方案

第一：对参数化网格空间的处理

为了构建一个多维度的、覆盖不同物理条件的恒星形成区的网格化参数空间，首先需要确定样本中的变量类型、及取值范围。根据观测上对恒星形成区物理条件的限制，以及变量在天体化学模型中对复杂有机分子化学演化的重要性，本项目计划选取以下 8 个变量作为主要的考察因素，它们分别为：初始氢核数密度（即致密分子云条件下的数密度），最终氢核数密度（即恒星形成区中

热核/温热核条件下的数密度), 初始气体温度 (即致密分子云条件下的温度), 最终气体温度 (即恒星形成区中热核/温热核条件下的温度), UV 辐射场强度, 宇宙线电离率, 分子云的演化时标, 以及热核/温热核在升温过程中的加热时标。这 8 个变量的取值范围见表 1, 其中加热时标分为快速加热时标、慢速加热时标、中等时间尺度的加热时标。

表 1 同时列出了本项目计划在这些变量的取值范围内选取的格点数。如果对表中的 8 个变量所在的参数空间进行全覆盖的网格化处理的话, 通过计算可以得知, 总共需要超过上百万的格点数, 而这对于做天体化学模拟是不现实的。为了降低参数空间中的格点数, 同时又尽量覆盖参数空间区域, 本项目计划只对最终氢核数密度、最终气体温度、加热时标这三个变量进行全覆盖的网格化处理, 而对其余的变量采用基准值的方式进行处理, 即在保持其它参数取值不变的情况下, 一次只改变这一个参数的取值, 它们的基准值见表 1。只对最终氢核数密度、最终气体温度、加热时标这三个变量进行全覆盖的网格化处理的原因是, 最终氢核数密度、最终气体温度可以对应具有空间分辨率的恒星形成区的成图观测, 而加热时标是一个不确定的参数。排除掉重复的格点, 最终可以得到的参数空间中的格点数超过 2 万个, 具体为 21060 个。

表 1 样本中选取的变量参数, 及取值范围和格点数。

变量参数	基准值	最小值	最大值	格点数
初始氢核数密度, $\log(nH_init, \text{cm}^{-3})$	4	4	5	10
最终氢核数密度, $\log(nH_final, \text{cm}^{-3})$	无	6	9	13
初始气体温度, K	10	10	50	9
最终气体温度, K	无	50	300	18
UV 辐射场强度, Habing	1.0	0.01	100	5
宇宙线电离率, $\times 1.3\text{e-}17 \text{ s}^{-1}$	1.0	0.01	100	5
分子云演化时标, $\log(\text{Time, year})$	5	5	5.7	5
加热时标	无	快速	慢速	3

第二：对参数空间中的格点进行天体化学模拟

分子是星际介质重要的组成部分之一, 是天体物理研究中示踪其空间分布、诊断其物理环境的重要手段。然而要回答星际分子的合成和起源等问题则涉及到化学方面的知识。通过化学反应动力学, 并结合星际介质实际的物理条件, 利用天体化学模拟的方法就可以得到分子随着时间的演化, 从而揭示分子在星

际介质中的化学演化特征。

星际化学反应动力学可以通过速率方程、蒙特卡洛等方法进行实现。由于蒙特卡洛方法的耗时性 (Chen et al. 2018)，不适用于本项目的大样本模拟。目前最常用的是速率方程方法，也是本项目将要采用的方法。一个典型的速率方程公式如下所示：

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{l,m}^N k_{lm} n_l n_m - n_i \sum_{j \neq i}^M k_j n_j + k_i^{des} n_i^s - k_i^{acc} n_i$$

其中， n_i 为分子 i 的密度， k_{lm} 为与分子 i 相关的合成反应的速率常数， k_j 为与分子 i 相关的分解反应的速率常数， k_i^{des} 为该分子从尘埃上解吸到气相的速率常数， k_i^{acc} 为该分子从气相吸附到尘埃上的速率常数。通过对化学反应动力学的速率方程进行求解，最终可以得到分子的密度随时间的演化。

结合天体化学模型，通过参数空间网格化后得到的格点，对每一个格点进行天体化学模拟，则可以得到多种复杂有机分子在多个时间点的丰度变化。模拟结果可以得到它们的丰度、合成/分解路径等信息。本项目重点关注恒星形成区中的复杂有机分子。通过对模型结果与观测数据的比较，以及恒星形成区不同物理条件对复杂有机分子化学演化的影响，最终揭示它们之间的内在联系。

可行性分析

目前，天体化学的理论基础已经成熟 (Semenov et al. 2010; Ruaud et al. 2016)，并有开源的代码可供调用 (<https://kida.astrochem-tools.org/codes.html>)。本项目将使用天体化学模拟程序 NAUTILUS (Ruaud et al. 2016) 进行天体化学模型的构建。申请人在这方面已经开展了多项工作，并将其运用到了不同的星际介质环境下来研究它们的化学演化 (Chen et al. 2022a, 2022b; Zhang et al. 2023)，因此具有良好的基础，保证了模型结果的可靠性和项目进行的可行性。

针对本项目大样本、多纬度的样本构建问题，本项目已经优化了参数空间覆盖的问题，通过对次要变量采用基准值的方法，使得初始的超过百万的格点数降低为 2 万多个，达到了可接受的、合理的程度。

最后，为了实际验证本项目的可行性，申请人前期已经开展了部分研究工作，对本项目的技术细节进行了实现。申请人已经编写了能够大规模地并行运行天体化学模型的程序，实现了高效地、自动化地处理模拟数据的功能；申请人同时对产出的数据库字段进行了设计，编写了针对数据库的构建和查询的代码，

从而方便地对数据进行操作，该数据库中包括了分子名称（涵盖目前已经探测到的和未探测到的共 50 种复杂有机分子）、高时间分辨率和跨度的演化时间点（从 10^5 年至最高 2×10^6 年）、以及表 1 中所示的 8 个维度的物理参数。

下图 4 展示了从数据库中抽取出来的部分结果，对比了甲酸甲酯、二甲醚和乙醇醛三种复杂有机分子在不同的氢核数密度下的丰度比（右图），并与观测到的三种分子在不同光度的热核中的柱密度之比进行了比较（左图）。可以看出，模型结果很好地复现了观测结果，证明了模型的可靠性和方法的可行性。

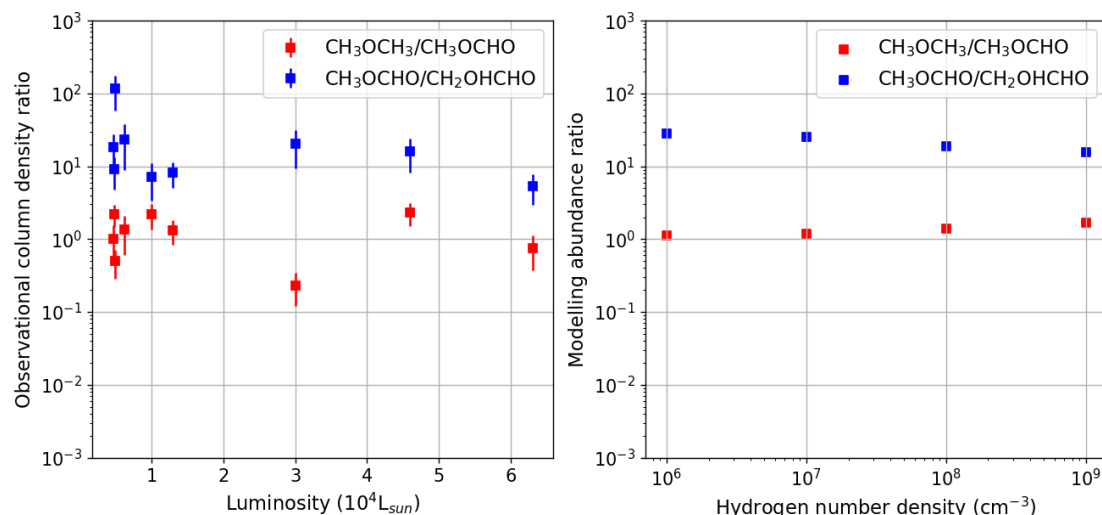


图 4 甲酸甲酯 (CH_3OCHO)、二甲醚 (CH_3OCH_3) 和乙醇醛 (CH_2OHCHO) 之间的观测柱密度比值和模型丰度比值的对比。左图：不同光度的热核观测结果，数据来源 Chen et al. 2023。右图：不同氢核数密度的热核模拟结果，模型参数：初始气体温度为 10 K，最终气体温度为 400 K，初始氢核数密度为 10^4 cm^{-3} ，最终氢核数密度如右图所示，UV 辐射场强度为 1 Habing，宇宙线电离率为 $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ ，分子云演化时间为 10^5 年，加热时标为中等时标 (2×10^5 年)，图中所示分子丰度的时间为 8×10^5 年。

参考文献

- Chen L.-F., Chang Q., Wang Y., Li D., 2022b, MNRAS, 516, 4627
- Chen L.-F., Chang Q., Xi H.-W., 2018, MNRAS, 479, 2988
- Chen L.-F., Li D., Quan D., Zhang X., Chang Q., Li X., Xiao L., 2022a, ApJ, 928, 175
- Chen Y., van Gelder M. L., Nazari P., Brogan C. L., van Dishoeck E. F., Linnartz H., Jorgensen J. K., et al., 2023, A&A, 678, A137
- Semenov D., Hersant F., Wakelam V., Dutrey A., Chapillon E., Guilloteau S., Henning T., et al., 2010, A&A, 522, A42
- Ruud M., Wakelam V., Hersant F., 2016, MNRAS, 459, 3756

4. 本项目的特色与创新之处；

- (1) 本项目将构建一个涵盖恒星形成区各种物理条件的参数化网格空间，并在此基础上创建一个**大样本天体化学模型数据库**。
- (2) **利用该数据库进行多方面的科学研究**，比如直接查询特定条件下的模型结果，与观测数据进行交叉对比；研究不同复杂有机分子之间的丰度比，揭示其化学相关性；研究含氮、含氧复杂有机分子在不同条件下的氮氧分化现象，并进行大样本的统计分析；等等。

5. 年度研究计划及预期研究结果（包括拟组织的重要学术交流活动、国际合作与交流计划等）。

年度研究计划

2025 年：确定样本中所使用的变量、及参数空间，对变量的取值范围进行格点化处理，构建参数化网格空间；完善前期已经开展的部分工作，进行天体化学模拟，得到最终的样本数据库；收集文献中关于恒星形成区中复杂有机分子的数据（如丰度、柱密度、激发温度等）。

2026 年：依靠获得的大样本天体化学模拟数据库，重点关注含氧复杂有机分子，得到它们的丰度、丰度比，统计它们的化学相关性；对恒星形成区不同物理条件下含氧复杂有机分子的化学演化规律进行统计分析，并与观测数据进行对比；撰写文章；

2027 年：重点关注恒星形成区中含氮类型的复杂有机分子，研究含氧、含氮复杂有机分子之间的化学关联，并与观测数据进行对比；撰写文章。

同时每年计划参加国内在恒星形成、天体化学等方面的学术会议，听取国内外最新研究进展报告，介绍自己的研究成果，加强学术方面的交流合作。

预期研究成果

在本项目期间，将构建一个多维度的、涵盖恒星形成区各种物理条件的参数化网格空间，并在此基础上创建一个**大样本的天体化学模拟数据库**；利用该数据库研究恒星形成区中含氧复杂有机分子、含氮复杂有机分子，以及它们的丰

度、丰度比、化学相关性、化学分化现象等在各种物理条件下的化学演化规律。在本项目期间，以第一作者身份预计发表论文 2 至 3 篇，本项目的研究结果还可以为观测研究者提供支持，预计参与发表合作文章 1 至 2 篇。

（二）研究基础与工作条件

1. 研究基础（与本项目相关的研究工作积累和已取得的研究工作成绩）；

本项目申请人了解天体化学的基本原理，对其中的基本过程、天体化学模拟、理论模型对观测结果的应用等方面具有较多的研究和工作产出。

申请人对天体化学中的一些基本过程具有较深入的了解，比如气相化学反应，尘埃表面化学反应，气相分子到尘埃表面的吸附过程，尘埃表面分子的解吸过程，以及尘埃冰化学（Chen et al. 2020）等。在此基础上，为了完成尘埃表面化学的研究，特别是分子在尘埃表面和冰层内的扩散机制，申请人可以扩展 NAUTILUS 天体化学模拟代码（即本项目采用的程序），以达到研究目的（Chen et al. 2024）。上述工作作为申请人深入研究天体化学模拟奠定了良好的基础。

在天体化学模拟方面，针对典型的冷暗分子云环境，研究了不同尺寸的尘埃以及它们的随机加热效应对分子云化学演化的影响（Chen et al. 2018），研究发现：尺寸越小的尘埃，其表现的随机加热效应越明显；在随机加热效应的作用下，尘埃上二氧化碳冰会更高效地被合成；另外，随机加热效应还会促使在尘埃上合成更多的复杂有机分子。为了解释冷暗分子云条件下（比如 TMC-1）观测到的气相复杂有机分子，我们扩展了上述工作，研究了在随机加热效应的作用下，不同尺寸的尘埃对气相中复杂有机分子合成的影响（Chen et al. 2022b）。结果表明，我们的模型可以很好地解释冷暗分子云条件下观测到的气相复杂有机分子。上述两个工作与本项目的研究对象有直接的关系，侧重于研究分子云阶段的复杂有机分子，为之后的恒星形成过程中的复杂有机分子演化起到了承上启下的作用。

另一方面，为了探究分子云中分子复杂性的起源，研究了从半透明云到致密云过渡区域的化学演化（Chen et al. 2022a）。研究发现，对于不同类型的物种（比如含碳的、含氧的、含氮的、含硫的分子），它们从原子气体到分子气体之间的化学演化具有不同的特征；另外随着介质从半透明云状态演化到致密云的状态，尘埃冰的主要组成成分也有所变化。上述工作揭示了分子从简单到复杂的演化

特征、以及水冰的化学，对研究复杂有机分子的合成与起源起到了参考依据。

在化学反应网络构建、热核和激波环境下的天体化学模拟等方面参与了相关工作 (Zhang et al. 2023; Zhao et al. 2024)，为本项目研究恒星形成区中的化学起到了辅助作用。

最后，天体化学模拟只有与观测相结合才能更好的发挥作用，模型结果可以用来辅助解释观测现象，而观测现象可以促进理论模型的发展。因此，项目申请人积极与观测研究者进行合作，在半透明云环境中的次甲基 (Tang et al. 2021)，红外暗云中的氨分子、碳链分子 (Xie et al. 2021)，以及热核中的含氧、含氮复杂有机分子 (Peng et al. 2022) 等方面做了相关贡献。这为申请人应用天体化学模型到具体的星际介质环境下，并用于辅助解释观测结果起到了实践作用。

相关工作成绩：

Chen L.-F., Chang Q., Xi H.-W., 2018, MNRAS, 479, 2988

Chen L.-F., Chang Q., Wang Y., Li D., 2022b, MNRAS, 516, 4627

Chen L., Li F., Chang Q., 2020, ChJCP, 33, 79

Chen L.-F., Li D., Quan D., Zhang X., Chang Q., Li X., Xiao L., 2022a, ApJ, 928, 175

Chen L.-F., Quan D., He J., Wang Y., Li D., Henning T., 2024, arXiv, arXiv:2403.04138

Peng Y., Liu T., Qin S.-L., Baug T., Liu H.-L., Wang K., Garay G., Zhang, C.; **Chen L.-F.**, et al., 2022, MNRAS, 512, 4419

Tang N., Li D., Luo G., Heiles C., Qin S.-L., Wang J., Xia J., **Chen L.-F.**, 2021, ApJS, 257, 47

Xie J., Fuller G. A., Li D., **Chen L.**, Ren Z., Wu J., Duan Y., et al., 2021, SCPMA, 64, 279511

Zhang X., Quan D., Li R., Esimbek J., **Chen L.-F.**, Zhao G., Zhou Y., 2023, MNRAS, 521, 1578

Zhao G., He M., Quan D., Yang X., **Chen L.-F.**, Li, D., Chang Q., et al., 2024, ApJ, submitted

2. 工作条件（包括已具备的实验条件，尚缺少的实验条件和拟

解决的途径,包括利用国家实验室、国家重点实验室和部门重点实验室等研究基地的计划与落实情况);

项目申请人已具备运行天体化学模型所需要的软件环境,申请人所在研究团队具有高性能计算等硬件服务资源。申请人所在团队在天体化学研究方面具有较多的工作积累,同时与其它研究团组及合作者保持着良好的合作交流关系。这为本项目的顺利开展提供了支持。

3. 正在承担的与本项目相关的科研项目情况(申请人正在承担的与本项目相关的科研项目情况,包括国家自然科学基金的项目和国家其他科技计划项目,要注明项目的资助机构、项目类别、批准号、项目名称、获资助金额、起止年月、与本项目的关系及负责的内容等);

申请人作为项目负责人正在主持一项由中国博士后科学基金会资助的面上资助项目(第73批),批准号:2023M733271,项目名称:冷分子云核中的长碳链分子生长问题研究,资助金额:8万元,起止年月:2023年8月至2025年8月。该项目研究的是冷分子云环境下的长碳链分子,比如 HC_{2n+1}N , C_nH , C_nH_2 , C_nO 等由3个以上的碳原子组成的碳链分子,这种类型的分子在冷分子云环境下被大量地观测到,而目前的天体化学模拟还难以解释它们的起源。因此该项目侧重于从量子化学计算的角度来研究这个问题,通过构建新的化学反应网络、寻找新的反应路径来解释冷云分子云环境下的长碳链分子的合成。

与本项目的联系:复杂有机分子的合成与化学反应网络和反应路径有密切的关系,如果在本项目的研究过程中得到了难以用当前的化学模型解释的复杂有机分子的观测现象,则可以从理论的角度推陈出新,构建新的化学模型。

4. 完成国家自然科学基金项目情况(对申请人负责的前一个已资助期满的科学基金项目(项目名称及批准号)完成情况、后续研究进展及与本申请项目的关系加以详细说明。另附该项目的研究工作总结摘要(限500字)和相关成果详细目录)。

无

(三) 其他需要说明的情况

1. 申请人同年申请不同类型的国家自然科学基金项目情况(列

明同年申请的其他项目的项目类型、项目名称信息，并说明与本项目之间的区别与联系)。

申请人作为合作者在本年度参与了一项国家自然科学基金面上项目的申请，项目名称为：银河系大型电离氢区对邻近分子云恒星形成及化学特征的作用的观测研究，该项目的主要研究内容为：银河系内大型电离氢区及其近邻分子云的射电波段原子、分子谱线观测，及电离氢区对周围分子云中恒星形成的反馈和物理化学特征的影响。该项目侧重于通过观测手段研究电离氢区和周围分子云的物理化学特征，申请人主要提供天体化学模型和对观测现象的理论解释等方面的支持。

2. 具有高级专业技术职务（职称）的申请人是否存在同年申请或者参与申请国家自然科学基金项目的单位不一致的情况；如存在上述情况，列明所涉及人员的姓名，申请或参与申请的其他项目的项目类型、项目名称、单位名称、上述人员在该项目中是申请人还是参与者，并说明单位不一致原因。

无

3. 具有高级专业技术职务（职称）的申请人是否存在与正在承担的国家自然科学基金项目的单位不一致的情况；如存在上述情况，列明所涉及人员的姓名，正在承担项目的批准号、项目类型、项目名称、单位名称、起止年月，并说明单位不一致原因。

无

4. 其他。

无