

doi: <https://doi.org/10.15407/kfnt2019.04.021>

УДК 524.316.7-36

**Я. В. Павленко**

Главная астрономическая обсерватория Национальной академии наук Украины,  
ул. Академика Заболотного 27, Киев, Украина, 03143  
Центр астрофизических исследований, Университет Гертвордшира,  
Гатфилд, Гертфордшир AL10 9AB, Великобритания  
ур@mao.kiev.ua

## Полосы SiO в инфракрасных спектрах звезд поздних спектральных классов

*Показана важность учета поглощения SiO в инфракрасной части спектра при анализе спектров звезд поздних спектральных классов. Используются списки линий поглощения фундаментальной системы SiO, рассчитанные группой Дж. Теннисона в рамках проекта EchoMol. В спектре красного гиганта HD 196610 (V\*EU Del) спектрального класса M6 III, взятом из библиотеки спектров IRTF, идентифицированы полосы изотопических молекул  $^{28}\text{SiO}$ ,  $^{29}\text{SiO}$ ,  $^{30}\text{SiO}$ . Посредством моделирования полос первого обертона SiO в спектре звезды получены оценки относительного содержания изотопов кремния в атмосфере HD 196610, оно оказалось близким (с точностью до 3 %) к солнечному. В то же время определенное посредством моделирования изотопических компонентов полос первого обертона CO изотопное отношение углерода  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 6 \pm 1$  свидетельствует о продвинутой стадии эволюции HD 196610.*

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Моноокись кремния SiO является широко распространенной астрономически важной молекулой в нашей Галактике. Первоначально линии SiO обнаруживались в радиодиапазоне. Так, в 1971 г. в работе [38] были обнаружены эмиссионные линии SiO в радиодиапазоне на длине волны 2.3 мм, формирующиеся в межзвездной среде по направлению к известному источнику радиоизлучения Saggitarius B2. Четырьмя годами позже в работе [16] была обнаружена мазерная линия SiO ( $J=2-1$ )

на частоте 86.24 GHz (3.48 мм) при наблюдениях Мирид спектрально-го класса M, т. е. звезд кислородной последовательности. Здесь уместно отметить, что до сих пор основная известность этой молекулы определялась все же ее способностью формировать мазерные линии, которые продолжают активно использоваться в астрофизических исследованиях (см. работы [34, 36, 40] и ссылки в них).

С другой стороны, молекула SiO, как и CO, имеет достаточно сильные колебательно-вращательные полосы в инфракрасной части спектра. В работе [17] была идентифицирована фундаментальная полоса в спектре M-сверхгиганта 119 Тау. Немного позже полосы первого обертона на 4 мкм были впервые обнаружены в работе [7] в спектре сверхгиганта Ori. При разрешении  $2 \text{ см}^{-1}$  R-ветви SiO хорошо видны, начиная с (2,0) головы в  $2497.2 \text{ см}^{-1}$ . В спектрах несколько более высокого разрешения  $R \sim 0.6 \text{ см}^{-1}$  гигантов и сверхгигантов M-типа и в спектре мириды S-типа  $\chi$  Cyg в работе [39] было обнаружено поглощение головы полосы (3,1) молекулы SiO. В исследовании [30] было уверенно обнаружено поглощение SiO в спектральном диапазоне 3.98...4.07 мкм при наблюдениях 74 M-гигантов и сверхгигантов. При этом было отмечено, что полосы быстро усиливаются в спектрах более холодных звезд, это справедливо по крайней мере до спектрально-го класса M6. Интенсивность полос SiO значительно варьирует среди M-супергигантов одного спектрального класса и сильно зависит от времени в переменных миридах. Полосы SiO наблюдаются в спектрах даже очень поздних M-звезд и холодных звезд типа S, демонстрируя характерную форму поглощения полос SiO. В атмосферах холодных богатых кислородом звезд молекула SiO является доминирующим источником непрозрачности в спектральных диапазонах, в которых расположены фундаментальные полосы или полосы первого обертона (см. также работу [6] и ссылки в ней).

В последние годы интерес к исследованию полос SiO значительно усилился, поскольку теоретические исследования горячих, плотных атмосфер экзопланет показали, что в них может содержаться значительное количество SiO и других силикатов [32, 33].

До недавнего времени основным источником информации о молекулярных линиях была база данных HITRAN [14], однако молекула SiO там отсутствует. Реальный прогресс был достигнут, когда [20] вычислили функцию электрического дипольного момента для молекулы SiO, которые не только воспроизвели «точные» дипольные моменты, но также и положение и интенсивность сильных линии вследствие вращательно-колебательных переходов внутри основного состояния. Наконец, более детальный анализ [2] квантовых уровней молекулы SiO и переходов между ними с использованием спектроскопических данных о наблюдаемых линиях этой молекулы в спектрах солнечных пятен [4, 11] позволил группе ExoMol рассчитать более корректный «горячий» список линий для SiO, т. е. список линий, формирующихся вследствие радиативных переходов на высоколежащие энергетичес-

кие уровни. Сравнение списков линий [20] и ExoMol приведено на рис. 2 в работе [2]. Ниже мы будем использовать спектроскопические данные об уровнях и переходах между ними, рассчитанных группой ExoMol.

Собственно основной задачей нашей работы было тестирование возможности использования нового списка линий SiO для моделирования спектров звезд поздних спектральных классов. В качестве наблюдаемого спектра использовался спектр звезды HD 196610 из базы данных спектрографа SPeX наблюдательного комплекса IRTF.

## 2. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

**2.1. Инфракрасные полосы поглощения молекул CO и SiO.** В определенной степени вращательно-колебательная структура спектра поглощения SiO подобна спектру CO. Естественно, вследствие большей массы молекулы SiO ее фундаментальная полоса и полосы первого обертона смещены в более длинноволновую часть спектра, они расположены на 8 и 4 мкм соответственно. При этом полосы поглощения первого обертона SiO ( $v=1$ ) перекрываются с фундаментальной полосой ( $v=1$ ) молекулы CO в области 4 мкм. В той работе анализируются результаты, полученные при моделировании полос SiO и CO в спектре М-гиганта. При этом в методической части работы мы предполагаем, что молекулы монооксидов углерода и кремния представлены в форме  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  и  $^{28}\text{SiO}$ . Однако при моделировании спектров конкретной звезды мы учитываем изотопические составляющие.

**2.2. Сумма по состояниям и константы диссоциативного равновесия SiO.** В общем случае сумма по состояниям молекулы рассчитывается по известной формуле

$$Q_{int} = \sum_{e,v,N} (2N+1)(2S+1) \exp[-(E_{e,v,N} - E_0)/kT],$$

где  $S$  — спин электрона,  $E_{e,v,N}$  — энергия электрона в возбужденном состоянии  $e$ ,  $v$  — вращательное квантовое число уровня с вращательным угловым моментом  $N$ ,  $E_0$  — энергия нулевого уровня.

В наших расчетах сумма по состояниям молекулы SiO требуется для расчета химического равновесия и при расчете синтетических спектров молекулы SiO. Молекула SiO относительно новая в такого рода работах. При расчетах очень важно, чтобы списки линий и молекулярные константы диссоциации были рассчитаны для согласованной спектроскопической модели молекулы. Поэтому константы диссоциации SiO были рассчитаны нами с использованием спектроскопических данных об уровнях этой молекулы из базы данных ExoMol [2]. Естественно, наши расчеты сумм по состояниям совпали в широком интервале температур с приведенными в работе [2]. В этой работе мы сравниваем также константы диссоциации, предоставленные в нескольких исследованиях, чтобы избежать возможных численных эф-

фектов из-за использования различных систем спектроскопических данных, см. п. 2.6.

**2.3. Синтетические спектры.** Синтетические спектры были рассчитаны с использованием программы WITA6 [21] для условий локального термодинамического равновесия, гидростатического равновесия и одномерных моделей атмосфер, рассчитанных по программе SAM12 [23] в рамках классических предположений. Здесь и далее мы используем термин «синтетические спектры» вместо «спектральное распределение энергии» для упрощения текста. Теоретические синтетические спектры были рассчитаны для 1D-моделей красных гигантов с эффективными температурами  $T_{\text{эф}} = 3500$  и  $3600$  К, и ускорением свободного падения на поверхности звезды  $lgg = 0, 1, 2, 3$ . Модели атмосфер и синтетические спектры рассчитаны для микротурбулентной скорости  $V_t = 3$  км/с.

**2.4. Ионизационно-диссоциативное равновесие.** Система уравнений ионизационно-диссоциативного равновесия решена для среды, состоящий из атомов, ионов и молекул. Нами было учтено около 100 компонентов [22]. Константы для уравнений химического баланса были взяты из работ [15, 35]. Чтобы определить концентрации атомов, ионов и молекул, использовалась методика [18], реализованная в программах ATLAS5 — ATLAS12. В рамках приближения локального термодинамического равновесия (ЛТР) концентрация молекул, состоящих из атомов, обозначенных  $1, 2, \dots, n$ , на стадии ионизации  $k^+$  определяется из решения уравнений Гулдберга — Вааге:

$$\frac{n_{1,2,\dots,l}^p}{n_i} = \frac{Q_{1,2,\dots,n} Q_e^p}{Q_i} \exp \left( -\frac{E_{1,2,\dots,l}}{kT} \right),$$

где  $n_i$  — концентрация  $i$ -го компонента,  $Q_i$  — суммы по состояниям, а  $E_{1,2,\dots,l}$  — это энергия диссоциации  $D_0$  молекулы, которая состоит из  $l$  атомов и имеет заряд  $p$ .

В программах Куруча ATLAS используется более удобное в вычислительном отношении представление:

$$\frac{N_i}{N_{1,2,\dots,l}} = \exp \left[ -\frac{E_{1,2,\dots,l}}{kT} - g(T) \right],$$

$$g(T) = b + c(T) + d(T) + e(T) + f(T) + \frac{3}{2}(l - p - 1) \ln T,$$

где значения  $b, c, d, e$  определяются для значений сумм по состояниям молекулы SiO из ExoMol [2] с использованием метода наименьших квадратов стандартной процедуры минимизации для диапазона температур  $300 \dots 5000$  К. Также в работе использованы константы  $b, c, d, e$ , рассчитанные автором для набора данных [35] с  $D_0 = 8.24$  эВ и константы из базы данных Куруча ( $D_0 = 8.26$  эВ), см. табл. 1.

**Таблица 1.** Константы диссоциативного равновесия SiO, рассчитанные по данным разных исследований

$D_0$ , эВ	$b$	$c$ , $10^{-3}$	$d$ , $10^{-6}$	$e$ , $10^{-10}$	$f$ , $10^{-15}$	Литературный источник
8.242	48.39	1.421	0.2389	0.2245	0.8133	[35]
8.260	48.94	1.925	0.3801	0.3933	1.5480	Эта работа
8.260	48.482	1.5553	0.2927	0.33106	1.5597	[19]

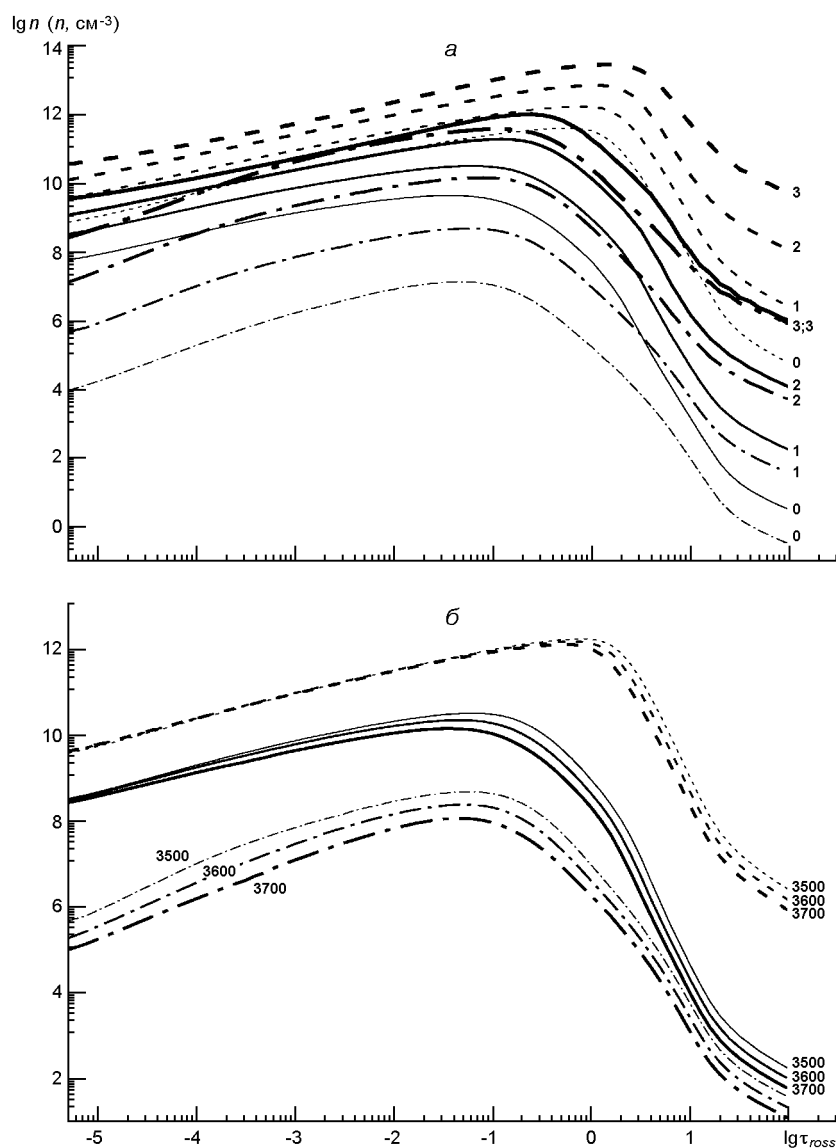


Рис. 1. Молекулярные концентрации SiO (сплошные линии), CO (штриховые) и H<sub>2</sub>O (штрих-пунктирные линии), рассчитанные для моделей атмосфер красных гигантов: *a* — при  $T_{\text{эф}} = 3600$  К для разных значений  $\lg g = 0, 1, 2, 3$  (числа у кривых, толщина линий увеличивается с увеличением  $\lg g$ ); *б* — при  $\lg g = 1.0$  для разных значений  $T_{\text{эф}} = 3500, 3600, 3700$  К (числа у кривых, толщина линий увеличивается с увеличением  $T_{\text{эф}}$ )

Мы проанализировали зависимость концентрации молекулы SiO от эффективной температуры и ускорения свободного падения для моделей атмосфер, которые были рассчитаны нами в этой работе. Здесь следует отметить, что изменения молекулярных концентраций SiO при изменении спектрального класса звезды были отмечены в работе [12]. Наши результаты расчетов молекулярных концентраций SiO для моделей атмосфер с разными значениями  $T_{\text{эф}}$  и  $lgg$  показаны на рис. 1.

**2.5. Источники непрозрачности.** Учетные источники непрозрачности в непрерывном спектре описаны в работе [24]. Наши расчеты производились для списков атомных линий из VALD3 [31], а также молекулярных линий H<sub>2</sub>O [1], основной изотопической молекулы <sup>28</sup>SiO, а также <sup>29</sup>SiO, <sup>30</sup>SiO [2], <sup>12</sup>C и <sup>13</sup>C [13]. При этом профиль отдельной линии поглощения описывался функцией Фойгта, расчет параметров расчета уширения линий описан в работе [25]. Профиль полос первого обертона показан на рис. 2а.

На рис. 2б показан участок теоретических спектров SiO, вычисленных с помощью сумм по состояниям, полученным в различных исследованиях (см. табл. 1). При сравнении этих теоретических спектров оказалось, что они идеально накладываются друг на друга, т. е. изменения интенсивностей полос и отдельных линий поглощения SiO, которые бы объяснялись различиями принимаемых значений потенциала диссоциации, практически незаметны.

**2.6. Фундаментальная полоса SiO и полосы первого обертона.** Как было отмечено выше, фундаментальная система полос SiO ( $\nu = 1$ ) лежит в ИК-области спектра (см. рис. 2а). При расчетах спектров, показанных на рис. 2а, было использовано предположение, что весь SiO находится в форме <sup>28</sup>Si<sup>16</sup>O. Это упрощает наш анализ наблюдений спектра фундаментальной полосы SiO довольно низкого разрешения ( $R \approx 1500$ , сообщение Эванс и др. (2019), arXiv:1904.04731). В то же

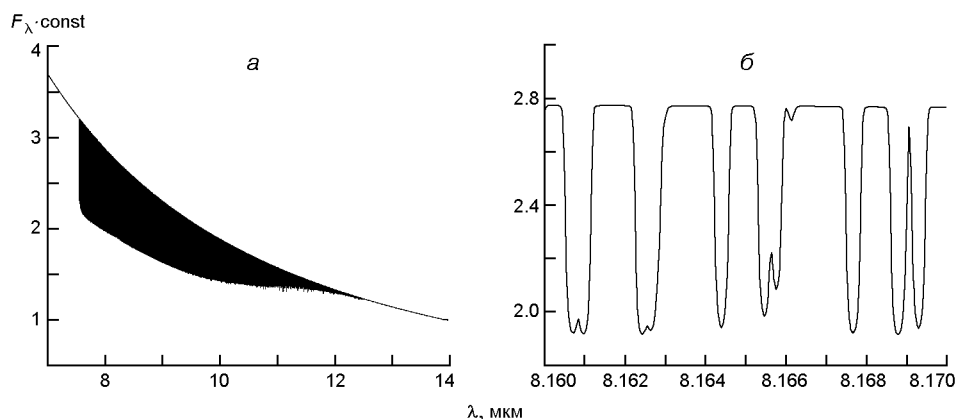


Рис. 2: а — линии фундаментальной полосы SiO ( $\nu = 1$ ), рассчитанные для модели атмосферы красного гиганта 3600/3.0/0; б — поток излучения в линиях поглощения фундаментальной системы полос SiO, рассчитанный с суммами по состояниям, полученным в различных исследованиях (см. табл. 1)

время даже при моделировании спектров полос SiO первого обертона с разрешением  $R = 1500 \dots 2000$  достаточно четко проявляются головы полос изотопических молекул  $^{29}\text{SiO}$  и  $^{30}\text{SiO}$  (см. п. 4.2). Здесь будет уместным отметить, что фундаментальная полоса SiO существенно блендируется полосами водяного пара, это блендирование усиливается при увеличении  $\lg g$  (см. п. 4.1).

### 3. НАБЛЮДАТЕЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

В этой работе мы применили наши списки линий и модели атмосфер для воспроизведения профилей спектральных полос CO и SiO в спектре красного гиганта HD 196610 (V\*EU Del). База данных SIMBAD [37] определяет HD 196610 как долгопериодическую переменную звезду. Инфракрасный спектр этой звезды взят из известной библиотеки спектров, полученных на спектрографе SPEX-телескопа IRTF [29], спектральное разрешение спектра  $R \sim 2000$ . SPEX-спектр этой звезды содержит спектральные области полос первого обертона CO и SiO.

В этой работе мы определяем лучшее соответствие наблюдаемых  $F^{obs}$  и рассчитанных  $F^{comp}$  спектров посредством определения минимума функционала, определяющегося суммой квадратов разностей между этими спектрами:

$$f(s, h, R) = (F^{obs} - F^{comp})^2,$$

где параметры процедуры минимизации суть:  $s$  — относительный сдвиг по горизонтальной оси спектров,  $h$  — нормировочный (масштабирующий) множитель для нахождения соответствия спектров в вертикальной плоскости,  $R$  — параметр разрешающей способности. Эта процедура применялась в наших работах [26—28], где приведено ее детальное описание. Здесь мы приводим только общее описание методики для сохранения целостности изложения материала.

### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ

**4.1. Полосы полос SiO и CO на фоне полос H<sub>2</sub>O. Зависимость от ускорения свободного падения в атмосфере.** В спектрах звезд поздних спектральных классов полосы SiO формируются на фоне многочисленных линий H<sub>2</sub>O, интенсивность которых также изменяется при изменении эффективной температуры  $T_{\text{эф}}$  и ускорения свободного падения  $\lg g$ . При увеличении  $T_{\text{эф}}$  концентрации молекул ожидаемо уменьшаются; этот эффект более выражен для H<sub>2</sub>O. В целом интенсивность молекулярных полос усиливается в спектрах звезд более поздних спектральных классов.

Ситуация со спектром SiO, формирующемся в атмосферах звезд с различными значениями  $\lg g$  более неоднозначная. С одной стороны, в

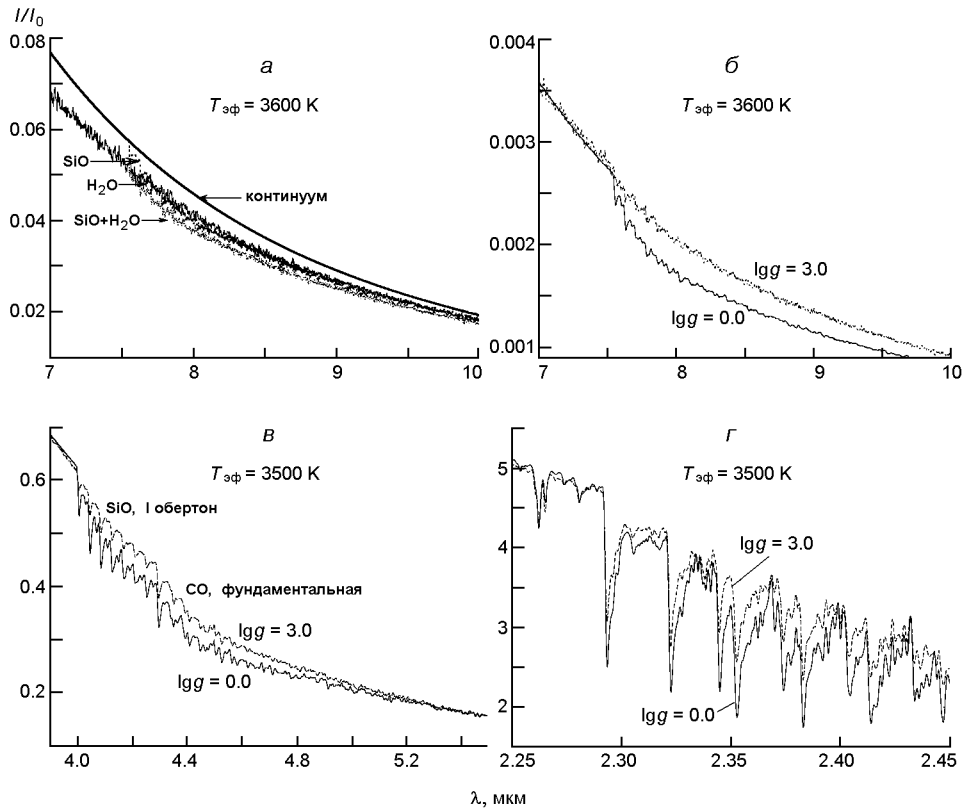


Рис. 3: а — относительная интенсивность полос  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{SiO}$  в спектре М-гиганта (модель 3600/3.0/0); б, в, г — зависимости интенсивности полос  $\text{SiO}$  и  $\text{CO}$  от  $\lg g$  (б — фундаментальная полоса  $\text{SiO}$ , в — фундаментальная полоса  $\text{CO}$  и полосы первого обертона  $\text{SiO}$ , г — полосы первого обертона  $\text{CO}$ )

атмосферах звезд одинаковой температуры  $T_{\text{эф}}$  концентрация молекул  $\text{SiO}$  естественным образом увеличивается с увеличением  $\lg g$ , однако это увеличение более выражено для  $\text{H}_2\text{O}$  (см. рис. 1). Это приводит к тому, что относительная интенсивность полос  $\text{SiO}$  может даже уменьшаться в спектрах звезд-карликов по сравнению с гигантами. С другой стороны, протяженность атмосфер звезд с меньшими значениями  $\lg g$  больше, количество молекул на луче зрения на всей протяженности областей формирования спектральных линий больше в атмосферах звезд большей светимости. В конечном счете именно этот фактор становится определяющим в объяснении большей интенсивности полос  $\text{CO}$  и  $\text{SiO}$  в спектрах гигантов (см. рис. 3).

#### 4.2. Линии изотопических молекул $\text{SiO}$ в спектре HD 196610.

Анализ спектра полос первого обертона  $\text{SiO}$  в спектре HD 196610 был выполнен в три этапа:

1) в спектре звезды были визуально определены спектральные детали на длинах волн голов полос изотопических компонентов  $\text{SiO}$ , показанных на рис. 4б;

2) на следующем этапе уточнялся параметр ускорения свободного падения в атмосфере HD 196610. Для этого был использован факт из-



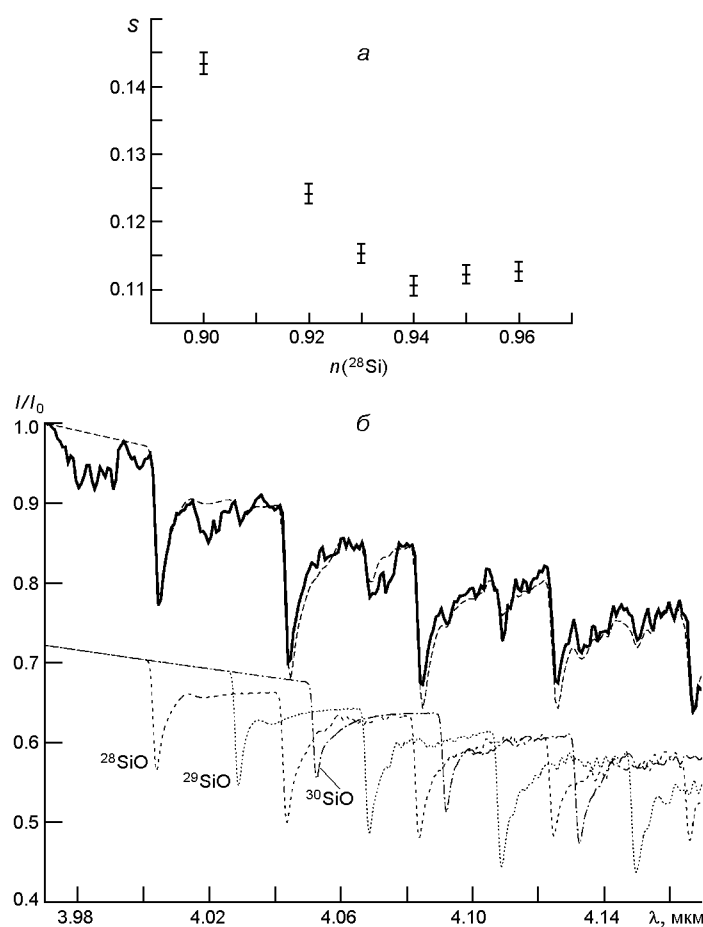


Рис. 4: *a* — Зависимость параметра минимизации  $S$  от  $n(^{28}\text{Si})$ ; *б* — лучшее воспроизведение наблюдаемого спектра М-гиганта HD 19660 (жирная сплошная линия) теоретическим спектром (штриховая линия), рассчитанным для модели атмосферы 3500/1.0/0 с  $n(^{28}\text{Si}) = 0.95$  и отношением  $^{28}\text{Si} : ^{29}\text{Si} : ^{30}\text{Si} = 0.94:0.03:0.03$ . Внизу показаны профили рассчитанных полос  $^{28}\text{SiO}$ ,  $^{29}\text{SiO}$  и  $^{30}\text{SiO}$

менения силы полос первого обертона SiO при вариациях  $\lg g$  (см. п. 4.1 и рис. 1 и 3). Эффективная температура звезды известна достаточно хорошо, в работе [9] было получено значение  $T_{\text{эф}} = 3508$  К, последние данные Gaia DR2 дают  $T_{\text{эф}} = 3484.5$  К. Расчеты в этой работе проведены для близкой к этим значениям эффективной температуры  $T_{\text{эф}} = 3500$  К, что не должно сказаться на основных выводах работы, учитывая относительно слабую зависимость полос SiO от  $T_{\text{эф}}$  (см. рис. 1). Сравнение теоретических спектров, рассчитанных для моделей атмосфер с  $T_{\text{эф}} = 3500$  К и  $\lg g = 0.0, 1.0, 2.0, 3.0$  с участком наблюдаемого спектра, содержащего полосы первого обертона SiO, показало наилучшее их совпадение при  $\lg g = 1.0$ . На этом этапе расчеты производились для солнечного содержания изотопов и содержания элементов;

3) определялся изотопный состав кремния путем расчетов для набора содержания изотопов кремния, перечисленных в табл. 2.

**Таблица 2.** Относительные содержания изотопов кремния, использованные при моделировании наблюдаемых полос первого обертона молекулы SiO, а также солнечные значения этих величин [8]

$n(^{28}\text{Si})$	$n(^{29}\text{Si})$	$n(^{30}\text{Si})$
	Солнце [8]	
0.92	0.05	0.03
	HD 196610	
0.92	0.05	0.03
0.93	0.04	0.03
0.94	0.03	0.03
0.95	0.02	0.03
0.96	0.01	0.03
0.97	0.00	0.03

Параметр минимизации  $S$  показывает явную зависимость от принятого изотопного отношения для кремния (см. рис. 4а), с минимумом на  $^{28}\text{Si} : ^{29}\text{Si} : ^{30}\text{Si} = 0.95:0.02:0.03$ . Формальная ошибка этих определений равна 0.1, фактическая ошибка, определяющаяся в значительной степени и качеством наблюдательного материала, больше, и составляет 0.02 dex. Однако даже в этих наблюдательных спектрах полосы изотопических компонентов молекул SiO выражены достаточно хорошо, но для более точного определения изотопного состава кремния требуется спектральный материал лучшего качества.

К сожалению, разрешение использованных спектров недостаточно высоко, чтобы определить относительное содержание всех изотопов кремния, поэтому в расчетах варьировалось только содержание более обильных  $^{28}\text{Si}$  и  $^{29}\text{Si}$ . При этом мы предположили, что весь наличный кислород имеет форму  $^{16}\text{O}$ .

#### 4.3. Линии изотопических молекул CO в спектре HD 196610.

Система полос первого обертона CO на 2.3 мкм традиционно используется при анализе физических характеристик атмосфер звезд поздних спектральных классов на разных стадиях эволюции (см. работы [26—28]). В нашем случае воспроизведение системы полос  $^{12}\text{C}$  и  $^{13}\text{C}$  в спектре HD 196610 представляет самостоятельный интерес. Действительно, определение  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  позволяет уточнить эволюционный статус этого красного гиганта. В то же время это исследование значимо для оценки и сравнения возможностей использования для астрофизического анализа полос первого обертона SiO, которые расположены в более длинноволновой области инфракрасного спектра звезды.

При определении  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  мы использовали обычную для таких исследований процедуру, описанную выше для анализа полос SiO:

— в спектре звезды были визуально отождествлены изотопические компоненты CO;

— для модели атмосферы с  $T_{\text{эф}} = 3500$ ,  $\lg g = 1.0$  были рассчитаны синтетические спектры для набора  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ ;

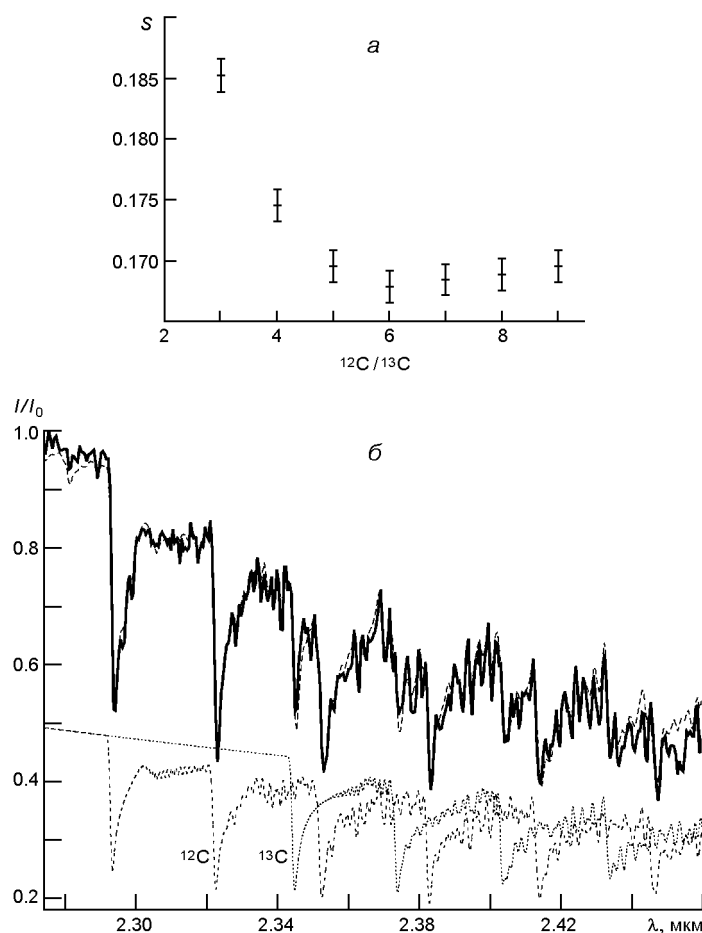


Рис. 5: *a* — Зависимость параметра минимизации  $S$  от  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ; *б* — лучшее воспроизведение наблюдаемого спектра М-гиганта HD 19660 теоретическим спектром, рассчитанным для модели атмосферы 3500/1.0/0 при  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 6$ . Внизу показаны профили рассчитанных полос  $^{12}\text{C}$  и  $^{13}\text{C}$

— параметр минимизации показывает зависимость от  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ , минимум  $S$  определяет  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 6 \pm 1$  (рис. 5*a*). На рис. 5*б* показано воспроизведение изотопических полос CO в спектре HD 196610.

## 5. ОБСУЖДЕНИЕ

Главным результатом этой работы является воспроизведение полос первого обертона изотопических молекул кремния (и углерода) в спектре звезды HD 196610, М-гиганта позднего спектрального класса. Несмотря на относительно невысокое спектральное разрешение наблюдательного материала, в спектре звезды уверенно идентифицируются головы полос изотопических молекул  $^{28}\text{SiO}$ ,  $^{29}\text{SiO}$ ,  $^{30}\text{SiO}$ . Наш анализ не показал существенных отклонений изотопного состава

кремния ( $> 3\%$ ) от солнечного. Этот результат, несомненно, представляет интерес, поскольку изотопный состав углерода показывает относительно низкое значение  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 6 \pm 1$ . Сравнительно низкое отношение  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  в атмосфере HD 196610 свидетельствует о том, что этот гигант находится на продвинутой стадии эволюции. Действительно, известные результаты [10] исследования  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  в звездах разного эволюционного статуса, принадлежащих шаровому скоплению M67, показывают, что субгиганты, скорее всего, подверглись небольшому перемешиванию, либо вовсе не перемешивались. Звезды нижней ветви гигантов демонстрируют нормальные соотношения после первого перемешивания. Изотопное отношение в атмосферах звезд большей светимости значительно ниже, чем предсказывают стандартные теории перемешивания ( $\sim 20$ ) [5], что свидетельствует о наличии дополнительного перемешивания в их недрах [3]. Детальное рассмотрение проблемы находится за рамками этой работы, однако представляется несомненным, что совместное определение изотопного состава углерода и кремния сможет прояснить детали эволюции вещества в Галактике, поскольку ядерные реакции их формирования и необходимые для них физические условия весьма разнятся.

Методически задачи определения изотопических компонентов CO и SiO подобны, поскольку структура их вращательно-колебательных полос весьма похожа. В то же время полосы фундаментальные полосы и полосы первого обертона SiO расположены в более длинноволновой части спектра. С другой стороны, относительное содержание изотопических компонентов  $^{29}\text{SiO}$  и  $^{30}\text{SiO}$  в атмосферах большинства звезд на поздних стадиях эволюции меньше, чем  $^{13}\text{CO}$ . По крайней мере это справедливо для атмосферы исследованного здесь красного гиганта HD 196610.

В работе моделировались полосы SiO и CO, наблюдаемые в инфракрасном спектре красного гиганта HD 196610. Здесь использованы оценки [9] солнечного содержания элементов в атмосфере звезды. Этот результат позволил нам уточнить значение  $l_{\text{gg}}$ , используя зависимость интенсивности полос первого обертона SiO от ускорения свободного падения. Естественно, при более рафинированном подходе требуется более последовательный подход, состоящий в предварительном определении точного химического состава не только углерода, кремния и кислорода, но и других элементов, особенно определяющих покровный эффект, а значит и влияющих на структуру модели атмосферы. В то же время следует отметить на важность учета поглощения  $\text{H}_2\text{O}$  в спектральных диапазонах, где расположены инфракрасные полосы поглощения SiO и CO.

Само проведение этой работы стало возможным благодаря двум значимым событиям в современной астрофизике. Во-первых, группой ExoMol рассчитан весьма совершенный список линий изотопических молекул монооксида кремния. Во-вторых, стали доступными данные спектральных наблюдений, выполненных на инфракрасных спектрог-

рафах, установленных на телескопах IRTF. Здесь будет уместным отметить, что молекула SiO отсутствует в базе спектроскопических данных HITRAN, которая создавалась в основном для интерпретации спектров атмосфер Земли и планет.

Для использования в наших расчетах звездных атмосфер списки линий SiO были приведены к формату, используемому в программе WITA [21]. Особое внимание в работе было уделено расчету корректного расчета химического равновесия в звездных атмосферах. Действительно, сумма по состояниям молекулы SiO используется как при расчете химического равновесия, так и при расчетах синтетических спектров в части определения населенностей ее уровней. Мы применили константы химического равновесия, рассчитанные с использованием данных разных исследований, и получили при их использовании практически одинаковые интенсивности спектральных линий SiO в теоретическом спектре. Это означает, что по меньшей мере в части формального расчета химического равновесия и синтетических спектров полос поглощения SiO мы избежали грубых ошибок. Тем не менее, при использовании списков линий SiO нами использовались константы диссоциативного равновесия, рассчитанные для сумм по состояниям, которые были получены для той же модели молекулярных уровней.

При расчете инфракрасных спектров нами учитывалось поглощение излучения парами воды в инфракрасном диапазоне. По мнению автора, исследования зависимости концентрации молекул SiO и H<sub>2</sub>O и изменения интенсивностей их полос в звездах с разными значениями  $\log g$  представляет самостоятельный интерес.

И все же воспроизведение полос первых обертонов полос первого обертона изотопических молекул кремния в спектре M-гиганта позднего спектрального класса есть главный результат этой работы. Повидимому, на момент написания статьи (март 2019 г.) эта работа представляет первую попытку определения изотопического состава кремния в атмосферах звезд с использованием инфракрасных спектров звезд. Мы предполагаем продолжить наши исследования по исследованию изотопного состава кремния и углерода в атмосферах звезд Галактики.

## БЛАГОДАРНОСТИ

Большая благодарность моим коллегам Nye Evans (Astrophysics Group, Lennard Jones Laboratory, Keele University, UK), Dipankar Banerjee (Physical Research Laboratory, Navrangpura, India), Ulisse Munari (INAF Astronomical Observatory of Padova, Italy) совместная работа с которыми инициировала появление этой статьи. В работе использованы спектроскопические данные, рассчитанный группой ExoMol, автор благодарит авторов ExoMol, который финансируется ERC в рамках проекта Advanced Investigator 267219. В этом исследо-

вании использована база данных SIMBAD, разработанная CDS, Страсбург, Франция. В работе использованы результаты космической миссии Европейского космического агентства (ЕКА) Gaia. Эта работа основана частично на архивных данных, полученных с помощью инфракрасного телескопа НАСА, эксплуатируемого Гавайским университетом по контракту с Национальным управлением по авиации и исследованию космического пространства. Автор благодарит коллектив SAO/NASA ADS за разработку и поддержку их замечательной системы.

#### ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа финансировалась в рамках планового финансирования учреждений Национальной академии наук Украины.

#### REFERENCES

1. Barber R. J., Tennyson J., Harris G. J., Tolchenov R. N. (2006) A high-accuracy computed water line list. *Mon. Notic. Roy. Astron. Soc.* **368**, № 3. P. 1087—1094.
2. Barton E. J., Yurchenko S. N., Tennyson J. (2013) ExoMol line lists — II. The ro-vibrational spectrum of SiO. *Mon. Notic. Roy. Astron. Soc.* **434**, P. 1469—1475.
3. Boothroyd A. I., Sackmann I. J. (1999) The CNO isotopes: deep circulation in red giants and first and second dredge-up. *Astrophys. J.* **510**. P. 232—250.
4. Campbell J. M., Klapstein D., Dulick M., Bernath P. F., Wallace L. (1995) Infrared absorption and emission spectra of SiO. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **101**. P. 237.
5. Charbonnel C. (1994) Clues for non-standard mixing on the red giant branch from C-12/C-13 and C-12/N-14 ratios in evolved stars. *Astron. and Astrophys.* **282**, № 3. P. 811—820.
6. Cohen M., Witteborn F. C., Carbon D. F., et al. (1992) Spectral irradiance calibration in the infrared. III — The influence of CO and SiO. *Astron. J.* **104**, № 5. P. 2045—2052.
7. Cudaback D. D., Gaustad J. E., Knacke R. F. (1971) Silicon monoxide in the infrared spectrum of alpha Orionis. *Astrophys. J. Lett.* **166**. P. L49.
8. De Bievre P., Taylor P. (1993) Table of the isotopic compositions of the elements. *Int. J. Mass Spectrom. and Ion Proc.* **123**. P. 149—166.
9. Dyck H. M., van Belle G. T., Thompson R. R. (1998) Radii and effective temperatures for K and M giants and supergiants. II. *Astron. J.* **116**, № 2. P. 981—986.
10. Gilroy K. K., Brown J. A. (1991) Carbon isotope ratios along the giant branch of M67. *Astrophys. J.* **371**. P. 578—583.
11. Glenar D. A., Hill A. R., Jennings D. E., Brault J. W. (1985) Vibration-rotation parameters for high-temperature silicon monoxide from sunspot spectra. *J. Mol. Spectrosc.* **111**. P. 403—414.
12. Goon G., Auman J. R. (1970) Molecular abundances in K and M Stars. *Astrophys. J.* **161**. P. 533—539.
13. Goorvitch D. (1994) Infrared CO line for the X 1 Sigma(+) state. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **95**, № 2. P. 535—552.
14. Gordon I. E., Rothman L. S., Hill C., et al. (2017) The HITRAN2016 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* **203**. P. 3—69.
15. Gurvich L. V., Veits I. V., Alcock C. B. (1989) *Thermodynamics properties of individual substances. Volume 1* — Elements O, H/D, T, F, Cl, Br, I, He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn, S, N, P, and their compounds. Part 1 — Methods and computation. Part 2 —

- Tables (4th revised and enlarged edition). New York: Hemisphere Publishing Corp. Pt. 1, 577 p.; Pt. 2, 352 p.
16. Kaifu N., Buhl D., Snyder L. E. (1975) Vibrationally excited SiO: A new type of maser source in the millimeter wavelength region. *Astrophys. J.* **195**, Pt 1. P. 359—366.
  17. Knacke R. F., Gaustad J. E., Gillett F. C., Stein W. A. (1969) A possible identification of interstellar silicate absorption in the infrared spectrum of 119 Tauri. *Astrophys. J. Lett.* **155**. P. L189—L192.
  18. Kurucz R. L. (1970) Atlas: a computer program for calculating model stellar atmospheres. *SAO Special Report.* **309**. 291 p.
  19. Kurucz R. L. (2014) *Problems with atomic and molecular data: Including all the lines.* P. 63—73.
  20. Langhoff S. R., Bauschlicher C. W. (1993) A theoretical study of the electric dipole moment function of SiO. *Chem. Phys. Lett.* **211**, № 4-5. P. 305—311.
  21. Pavlenko Y. V. (1997) A «lithium test» and modeling of lithium lines in late-type M dwarfs: Teide1. *Astron. Rep.* **41**. P. 537—542.
  22. Pavlenko Y. V. (1998) The «lithium test» and the spectra of late M dwarfs and brown dwarfs: Condensation effects. *Astron. Rep.* **42**. P. 787—792.
  23. Pavlenko Y. V. (2003) Model atmospheres of red giants. *Astron. Rep.* **47**. P. 59—67.
  24. Pavlenko Y. V. (2014) Molecular bands in the spectra of M stars. *Astron. Rep.* **58**. P. 825—834.
  25. Pavlenko Y. V., Shavrina A. V. (1986) On the damping constant in the atmospheres of K-giants. *Kinematics Phys. Celestial Bodies.* **2**, № 4. P. 63—66.
  26. Pavlenko Y. V., Geballe T. R., Evans A., et al. (2004) CO bands in V4334 Sgr (Sakurai's object): The  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  ratio. *Astron. and Astrophys.* 417. P. L39—L43.
  27. Pavlenko Y. V., Jones H. R. A. (2002) Carbon monoxide bands in M dwarfs. *Astron. and Astrophys.* **396**. P. 967—975.
  28. Pavlenko Y. V., Jones H. R. A., Longmore A. J. (2003) Carbon abundances and  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  from globular cluster giants. *Mon. Notic. Roy. Astron. Soc.* **345**. P. 311—324.
  29. Rayner J. T., Cushing M. C., Vacca W. D. (2009) The Infrared Telescope Facility (IRTF) spectral library: Cool stars. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **185**. P. 289—432.
  30. Rinsland C. P., Wing R. F. (1982) Observations of the first-overtone silicon monoxide bands in late-type stars. *Astrophys. J.* **262**. P. 201—212.
  31. Ryabchikova T., Piskunov N., Kurucz R. L., et al. (2015) A major upgrade of the VALD database. *Phys. scr.* **90** (5). P. 054005.
  32. Schaefer L., Lodders K., Fegley B. (2012) Vaporization of the Earth: Application to exoplanet atmospheres. *Astrophys. J.* **755**, № 1. id. 41. 16 p.
  33. Tinetti G., Drossart P., Eccleston P., et al. (2018) A chemical survey of exoplanets with ARIEL. *Exp. Astron.* **46**. P. 135—209.
  34. Tobin T. L., Kemball A. J., Gray M. D. (2019) Constraining theories of polarized SiO maser transport: Multi-epoch analysis of a  $n/2$  electric vector rotation feature. *Astrophys. J.* **871**, 2. id. 189. 17 p.
  35. Tsuji T. (1973) Molecular abundances in stellar atmospheres. II. *Astron. and Astrophys.* **23**. P. 411—431.
  36. Vlemmings W. H. T., Humphreys E. M. L., Franco-Hernandez R. (2011) Magnetic fields in evolved stars: Imaging the polarized emission of high-frequency SiO masers. *Astrophys. J.* **728**, № 2. id. 149. 8 p.
  37. Wenger M., Ochsenbein F., Egret D., et al. (2000) The SIMBAD astronomical database. The CDS reference database for astronomical objects. *Astron. and Astrophys. Suppl. Ser.* **143**. P. 9—22.
  38. Wilson R. W., Penzias A. A., Jefferts K. B., Kutner M., Thaddeus P. (1971) Discovery of interstellar silicon monoxide. *Astrophys. J. Lett.* **167**. P. L97.

39. Wollman E. R., Geballe T. R., Greenberg L. T., Holtz J. Z., Rank D. M. (1973) Observations of silicon monoxide in cool stars at 4.05 microns. *Astrophys. J. Lett.* **184**. P. L85.
40. Yoon D. H., Cho S. H., Kim J., Yun Y. J., Park Y. S. (2014) SiO and H<sub>2</sub>O maser survey toward post-asymptotic giant branch and asymptotic giant branch stars. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **211**. 15.

*Я. В. Павленко*

Головна астрономічна обсерваторія Національної академії наук України,  
Київ, Україна  
Центр астрофізичних досліджень Університету Гертвордшира,  
Гатфілд, Великобританія

#### СМУГИ SiO В ІНФРАЧЕРВОНИХ СПЕКТРАХ ЗІРОК ПІЗНІХ СПЕКТРАЛЬНИХ КЛАСІВ

Показано важливість врахування молекулярних полос поглинання SiO в інфрачервоній частині спектру при аналізі спектрів зір пізніх спектральних класів. Використано списки оберально-коливальних ліній поглинання системи смуг SiO, розраховані групою Дж. Теннісона в рамках проекту ExoMol. У спектрі червоного гіганта HD 196610 (V\*EU Del) спектрального класу M6 III, взятому з бібліотеки спектрів IRTF, ідентифіковано смуги ізотопічних молекул <sup>28</sup>SiO, <sup>29</sup>SiO, <sup>30</sup>SiO. За допомогою моделювання смуг першого обертона SiO у спектрі отримано оцінки відносного вмісту ізотопів кремнію в атмосфері HD 196610. Вони виявилися близькими (з точністю до 3 %) до сонячного. У той же час ізотопне відношення вуглецю <sup>12</sup>C/<sup>13</sup>C = 6 ± 1, отримане за допомогою моделювання ізотопічних компонентів смуг першого обертона CO, свідчить про просунуту стадію еволюції HD 196610.

*Ya. V. Pavlenko*

Main Astronomical Observatory of the National Academy of Sciences of Ukraine,  
Kyiv, Ukraine  
Center for Astrophysical Research, Hertfordshire University,  
Hatfield, United Kingdom

#### SiO BANDS IN INFRARED SPECTRA OF LATE SPECTRAL STARS

The importance of account the SiO absorption in the infrared spectrum for analyzing the spectra of stars of late spectral classes. We used lists of the absorption lines of the rotation-vibrational bands, calculated by the group of J. Tennison in the framework of the ExoMol project. In the spectrum of red giant HD 196610 (V\*EU Del, spectral class M6 III), taken from the IRTF spectra library we identified bands of isotopic molecules <sup>28</sup>SiO, <sup>29</sup>SiO, <sup>30</sup>SiO. The relative abundance of silicon isotopes in the atmosphere of HD 196610 were obtained by modeling the bands of the first overtone SiO in the spectrum of a star. It turned out to be close (to within three percent) to the «solar» value. At the same time, the carbon isotope ratio <sup>12</sup>C/<sup>13</sup>C = 6 ± 1, determined by fits to the observed isotopic bands of the first overtone of CO, testifies to the advanced stage of the evolution of HD 196610.

Статья поступила в редакцию 14.03.2019

После доработки 14.03.2018

Принята к публикации 18.04.2019