

# РОЛЬ КВАНТОВОХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В АСТРОХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Столяров АВ

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

Химический факультет

Одной из важнейших междисциплинарных областей современной фундаментальной науки стала в последние годы астрохимия, в задачу которой входит исследование особенностей эволюции молекулярного состава Вселенной в космологическом масштабе времени. На сегодняшний день однозначно идентифицировано более полутора сотен межзвездных и околозвездных молекул различного элементного состава и химической активности, которые встречаются в самых разнообразных астрономических объектах, начиная с планетных атмосфер и метеоритов и заканчивая различными фазами развития межзвездной среды (МЗС).

На сегодняшний день существует ряд крупных международных проектов наземного и космического базирования по экспериментальному изучению космического электромагнитного излучения в различных диапазонах длин волн. Однако, очевидный прогресс в астрономических (спектроскопических) исследованиях физико-химических процессов в космических объектах, межзвездной и околозвездной среде тормозится из-за отсутствия надежных данных о структуре и динамике, а также химической активности молекул, входящих в состав исследуемых астрономических объектов.

В докладе обсуждается уникальная роль современных квантово-химических расчетов высокого уровня при получении новых фундаментальных данных об энергетических, радиационных, магнитных и электрических свойствах, химических превращениях и взаимодействии с космическим излучением молекулярных соединений, составляющих основу таких астрономически важных объектов, как атмосферы планет Солнечной системы и экзопланет, комет, метеоритов, холодных звезд, различных фракций МЗС, включая космическую пыль и пр.

Особое внимание в докладе уделено описанию прототипа так называемого «компьютерного спектрометра», способного моделировать (иногда только из первых принципов) спектры исследуемых астрономических объектов на экспериментальном уровне точности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 18-13-00269 и 18-03-00726)