Межфакультетский учебный курс

«**Астрохимия – молекулы во Вселенной**»

Андрей Владиславович Столяров

Дмитрий Зигфридович Вибе

**Аннотация**

Предлагаемый курс направлен на приобретение студентами различных специальностей основ физико-химических знаний о строении и динамике межзвездного и околозвездного вещества, а также понимание основ использования этих знаний при решении специализированных астрофизических задач, таких как динамика межзвездной среды (МЗС), процессы образования звезд и планет, анализ планетных атмосфер, комет и околозвездных газопылевых оболочек. Основное внимание уделяется изучению молекулярных спектров, спектроскопическим методам определения параметров МЗС, взаимодействию молекул с полем излучения, синтезу органических молекул в протозвездном и протопланетном веществе. На примере изучения тонкого строения молекулярных спектров обсуждаются такие их астрофизические приложения, как определение температуры реликтового излучения, изотопическое фракционирование, космологическая проверка зависимости фундаментальных физических констант от времени. Рассматриваются основные механизмы протекания химических реакций в МЗС, детали которых определяются принципиальным отличием внешних условий (температура, давление, магнитное поле, электромагнитное и космическое излучение, элементный и фазовый состав, космологический масштаб времени) характерных для МЗС по сравнению с аналогичными «земными» параметрами. В силу ограниченности наблюдательного характера исследования далеких космических объектов особое внимание уделено анализу современных методов астрономической спектроскопии, а также существующим сейчас возможностям и ограничениям экспериментально-теоретического моделирования в лабораторных (наземных) условиях реально протекающих астрохимических процессов.

**Литература**

1. **Т.Л.Уилсон, К.Рольфс, С.Хюттемейстер, Инструменты и методы радиоастрономии. Физматлит, 2012**
2. **Н.Г. Бочкарёв, Основы физики межзвездной среды. Либроком, 2010**
3. **Ч.Таунс и А.Шавлов, Радиоспектроскопия, *Иностранная литература*, 1959.**
4. **J.Tennyson, Astronomical Spectroscopy, Imperial College Press, 2010.**
5. **S.Miller, The Chemical Cosmos, Springer, 2011.**
6. **H.McSween and G.R.Huss, Cosmochemistry, Cambridge University Press, 2010.**

**План лекций**

# 1. Звезды и межзвездная среда

Строение Галактики. Межзвездная среда — важная составная часть нашей Галактики и других галактик. Основные фазы межзвездной среды. Факторы, определяющие физическое состояние межзвездной среды, источники энергии и механизмы охлаждения. Химический состав межзвездного вещества. Космическая пыль, космические лучи, магнитное поле, поле излучения. Роль межзвездной среды в галактической экосистеме. Молекулярные облака. Круговорот вещества в Галактике.

# 2. Введение в астрохимию

Молекулярный состав межзвездного, околозвездного, звездного, межпланетного и планетного вещества. Предмет и задачи астрохимии. Особенности физико-химических превращений в космическом пространстве. Изучение молекулярных облаков, околозвездных газопылевых оболочек, комет и планетных атмосфер. Проблемы межзвездной химии и ее роль в процессе образования звезд и планет. Межзвездные молекулы как диагностический инструмент для изучения эволюции межзвездного вещества. Молекулы в звездах и спектральная классификация.

# 3. Астрономическая спектроскопия

Природа и классификация электромагнитного спектра молекулярных систем. Методы экспериментальной и теоретической спектроскопии. Основные понятия переноса излучения. Поглощение, вынужденное и спонтанное излучение. Поляризация излучения. Оптическая глубина и критическая плотность. Энергетические параметры молекул и ионов. Правила отбора. Вероятности радиационных и нерадиационных переходов. Естественная ширина линии. Влияние внешней среды. Межмолекулярные взаимодействия и внешнее электромагнитное поле Механизмы излучения планетарных туманностей.

# 4. Методы исследования межзвездной и околозвездной среды

Особенности астрономических наблюдений межзвездного вещества в ультрафиолетовом, оптическом инфракрасном и радиодиапазонах. Пропускание земной атмосферы.

# 5. Инструменты для наблюдения астрохимически важных молекул

Устройство телескопов различных диапазонов. Основные наземные и космические обсерватории. История открытия межзвездных и околозвездных молекул.

# 6. Спектры и строение астрономически важных молекул

Основы молекулярной спектроскопии и квантовой химии. Электронная структура и поверхность потенциальной энергии. Релятивистские эффекты. Расчет равновесной геометрии и переходного состояния. Влияние внутримолекулярных взаимодействий на электронный спектр поглощения изотопомеров молекулярного водорода. Радиоспектроскопические исследования сверхтонкой структуры. Сверхвысокочастотные спектры астрономических объектов. Космические мазеры. Космологическая проверка зависимости фундаментальных физических констант от времени.

# 7. Астрохимические приложения химической термодинамики

Приближение локального термодинамического равновесия. Понятие об электронной, колебательной и вращательной температурах. Расчет равновесного состава гомогенных смесей. Формула Саха как пример константы ион-молекулярного равновесия. Статистические оценки термодинамических свойств газообразных веществ и процессов с их участием. Электронные базы данных термодинамических свойств индивидуальных соединений и расчета равновесий. Квантово-химические методы расчета термодинамических функций. Изотопическое фракционирование в холодных межзвездных облаках.

# 8. Основы химической кинетики и катализа межзвездных молекул

Формальная кинетика и механизмы реакций в газовой фазе. Зависимость константы скорости реакции от температуры. Кинетические особенности реакций при низких температурах и давлениях. Ион-молекулярные, фотохимические и цепные реакции. Катализ на поверхности межзвездных пылинок. Механизмы фотоионизации, автоионизации, электронной и диссоциативной рекомбинации. Излучательная ассоциация как механизм образования молекул в межзвездном пространстве.

# 9. Определения параметров межзвездной среды по молекулярным спектрам

Идентификация спектральных линий молекул и изотопический эффект. Вращательные, колебательные и электронные спектры. Диффузные спектры. Абсолютная и относительная интенсивность линий, особенности их измерений. Эффект насыщения. Измерение температуры и населенности уровней из интенсивности спектров. Определение температуры реликтового излучения. Уширение линий вследствие давления и температуры. Моделирование оптики атмосферы экзопланет. Взаимодействие молекул с магнитным полем. Эффект Зеемана при наличии сверхтонкой структуры.

# 10. Наблюдательные данные об астрохимии

Основные «резервуары» межзвездных молекул: диффузные облака, молекулярные облака, плотные ядра, протопланетные ядра, планеты, зоны ионизованного водорода.

# 11. Основы астрохимии

Основные закономерности формирования молекулярного состава межзвездного и околозвездного вещества. Роль внешних факторов — космические лучи, ультрафиолетовое излучение, рентгеновское излучение. Внегалактическая и догалактическая астрохимия. Лабораторная астрохимия.

# 12. Космическая пыль

Космическая пыль и ее роль в формировании молекулярного состава межзвездной и околозвездной среды. Виды и химический состав космических пылинок. Органическая пыль в космосе. Эволюция космических пылинок.

# 13. Астрохимия и звездообразование

Эволюция представлений об образовании звезд и планет. Современные представления о звездообразовании. Молекулярная диагностика различных этапов звездообразования и планетообразования с учетом изотопного фракционирования, «химические часы». Молекулы в протопланетных дисках. Химическая эволюция дисков на ранних этапах формирования планетной системы.

# 14. Астрохимия в численном моделировании эволюции межзвездной среды

Виды астрохимических моделей. Астрохимические базы данных. Численные методы интегрирования уравнений химической кинетики. Особенности интеграции астрохимических блоков в гидродинамические модели и самосогласование. Современные хемодинамические модели. Перенос излучения и синтетические наблюдения.

# 15. Астробиология

Сложные молекулы в межзвездной среде. Неидентифицированные инфракрасные полосы как признаки наличия сложных углеводородов. Полициклические ароматические углеводороды, наночастицы, фуллерены. Органические молекулы в околозвездном веществе: особенности диагностики и пути синтеза. Органические молекулы в Солнечной системе. Проблема хиральности.

**Вопросы к зачету**

1. Какую информацию о космических объектах можно извлечь из наблюдений молекулярных спектров?
2. Каковы правила отбора для вращательного квантового числа изолированной молекулы? Изменятся ли они в присутствии магнитного поля?
3. Как используется изотопический эффект в идентификации вращательных и колебательно-вращательных спектров?
4. Обоснуйте необходимость и возможность введения различных видов температур в статистическую сумму по состояниям?
5. Чем обусловлен процесс изотопического фракционирования? Приведите, пожалуйста, примеры соответствующих реакций.
6. Как была измерена температура реликтового излучения спектральными методами?
7. В чем состоит температурная особенность протекания ион-нейтральных и нейтрально-нейтральных реакций?
8. Перечислите принципы действия космических мазеров.
9. Чем обусловлено возможность наблюдения вращательных и колебательно-вращательных спектров молекулярного водорода?
10. Какие особенности строения спектров свободных радикалов OH, CN, CO, NO и CH Вы знаете?
11. Перечислите основные группы молекул, обнаруживаемых в межзвездной и околозвездной среде.
12. Опишите особенности астрономических наблюдений в различных диапазонах: ультрафиолетовом, оптическом, инфракрасном, радио.
13. Опишите основные закономерности химического синтеза в межзвездной среде.
14. Каковы основные фазы межзвездной среды в нашей Галактике, и каковы причины их появления?
15. Каковы современные представления об эволюции органических молекул в межзвездной среде и Солнечной системе?
16. В чём состоит смысл самосогласованного моделирования динамических и химических процессов в межзвездной среде?
17. Какие астрохимические базы данных Вы знаете, и какая информация в них включается?
18. Опишите основные типы астрохимических реакций?
19. Какова роль внешних факторов в астрохимических процессах?
20. Опишите свойства космической пыли. Какую роль она играет в астрохимических процессах?