

РАСШИРЕНИЕ БАЗЫ ДАННЫХ РЕАКЦИЙ КОДА MONACO В ОБЛАСТИ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

А. В. Квашнина, А. И. Васюнин
Уральский федеральный университет

В ходе сравнения баз данных химических реакций MONACO и R. Гэррода были выявлены значительные отличия этих двух баз. Единовременное расширение базы данных кода MONACO на основе данных R. Гэррода не представляется возможным. Поэтому процесс осуществлялся поэтапно:

- разделение молекул CH_2OH и CH_3O и реакций для них;
- добавление гликольальдегида, формамида и этиленгликоля и реакций для них.

После расширения базы данных химических реакций были проведены тестовые расчеты сложной органической химии для условий коллапсирующей протозвезды и горячего ядра.

MODIFICATION THE DATABASE OF CHEMICAL REACTIONS OF THE MONACO IN THE AREA OF ORGANIC MOLECULES

A. V. Kvashnina, A. I. Vasyunin
Ural Federal University

We compared the database of chemical reactions of MONACO and the database of R. Garrod and detected several significant differences. It proved to be impossible to perform a one-time extension of MONACO database using R. Garrod's data. So we were forced to extend the database of MONACO in the following steps:

- separate isotopes CH_2OH and CH_3O and their reactions;
- add glycolaldehyde, formamide and ethylene glycol and their reactions.

After that we performed test simulations for collapsed protostar and hot core stages.

MONACO — код, предназначенный для моделирования химической эволюции объектов межзвездной среды с учетом химических процессов в газе и на частицах пыли [1].

В коде MONACO используется база данных, которая включает более 600 молекул и реакции с ними, но она неполна в области органической химии. После расширения [2] базы данных на основе сетки

химических реакций Р. Гэррода (http://www.astro.cornell.edu/~rgarrod/wp-content/uploads/reactions_Science_paper.txt) результаты моделирования сильно отличались от наблюдательных данных. Исходя из этого, было принято решение о поэтапном расширении базы данных химических реакций кода MONACO.

На сегодняшний день разделены изомеры CH_2OH и CH_3O (до этого в базе данных присутствовала лишь молекула CH_3O). Кроме того, были добавлены молекулы гликольальдегида, формамида и этиленгликоля.

Суммарно база данных была расширена на четыре органические молекулы и более чем на 100 реакций с ними. На всех этапах для проверки согласования с наблюдательными данными проводилось численное моделирование для условий коллапсирующей протозвезды и стадии нагрева горячего ядра.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для молодых ученых — кандидатов наук, проект МК-8005.2016.2.

Библиографические ссылки

1. *Vasyunin A. I., Herbst E.* Reactive Desorption and Radiative Association as Possible Drivers of Complex Molecule Formation in the Cold Interstellar Medium // *Astron. J.* — 2013. — Vol. 796. — P. 34.
2. *Квашнина А. В., Васюнин А. И.* Расширение базы данных химических реакций кода MONACO для моделирования пребиотических молекул // *Физика космоса* : тр. 46-й Международ. студ. науч. конф., Екатеринбург, 30 янв.—3 февр. 2017 г. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2017. — С. 236.