

ПРОДУКТЫ РЕАКЦИИ АЦЕТОНИТРИЛА HC_3N С МЕТИНОВЫМ РАДИКАЛОМ CH В МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЕ

Крикунова Л.И.¹, Порфирьев Д.П.^{1,2}, Аязов В.Н.^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет им. С.П. Королёва, г. Самара, lubov_markova@inbox.ru

²Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН, г. Самара

Ключевые слова: нитрилы, метиновый радикал, химическая эволюция, теория функционала плотности.

Одной из задач астрохимии является изучение путей образования и разрушения межзвездных молекул. Полученные в этих процессах радикалы потенциально могут играть ключевую роль при формировании звездных систем подобных Солнечной [1, 2]. Наличие в спектрах многих тел внутри и за пределами Солнечной системы молекулярного и атомарного азота способствует формированию нейтральных молекул нитрилов, общей формулой $\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$. Раскрытие механизмов взаимодействия нитрилов с радикалами в межзвездной среде является ключевым шагом в изучении химической эволюции. Цианоацетилен (HCCCN) является одним из самых распространенных нитрилов на Титане [3]. Он считается важным предшественником более сложных соединений, содержащих N, в органических аэрозолях Титана [4] и участвует в формировании ледяных облаков C_4N_2 [5]. В дополнение к случаю Титана, реакции с ацетонитрилом представляют интерес и в случае Плутона, который также характеризуется разреженной атмосферой, богатой азотом, что было обнаружено в ходе пролета миссии New Horizons [6]. В отличие от случая Титана, фотохимические модели атмосферы Плутона находятся в самом начале своего воплощения, но роль реакций с углеводородами и нитрилами важна и для атмосферы Плутона, так как в ней уже обнаружены соединения C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 или предположительно присутствуют HCN , $\text{C}_2\text{H}_3\text{CN}$ [7-10].

В работе с использованием гибридного метода теории функционала плотности ωB97xd с базисным набором cc-pvtz в программном пакете Gaussian09 рассчитаны относительные потенциальные энергии промежуточных и переходных состояний химической реакции с ацетонитрилом с метиновым радикалом [11, 12, 13].

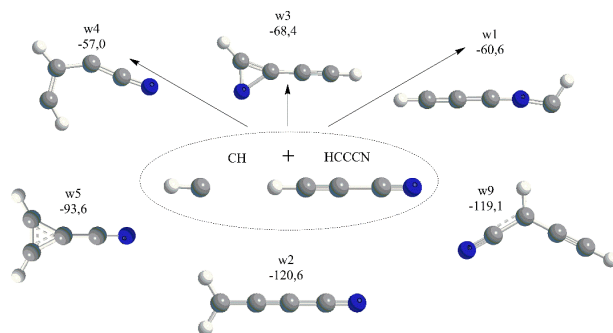


Рисунок 1 – Начальные аддукты реакции $\text{CH} + \text{HCCCN}$

Начальные аддукты реакции образуются безбарьерно за счет высокой реакционной способности радикала CH (рис. 1). Дальнейшее течение нейтрально-нейтральной реакции происходит с образованием пяти и четырёхчленных гетероциклических соединений, которые могут стать потенциальным предшественниками для образования других нитрилов (HCN , C_3N) или более сложных органических соединений в планетарных атмосферах, таких как атмосфера Титана и Плутона, в кометных комах и в облученных УФ-излучением межзвездных средах.

Список литературы

1. P. Caselli and C. Ceccarelli, Caselli, Our astrochemical heritage. *The Astronomy and Astrophysics Review*, 20(1), 56 (2012). doi:10.1007/s00159-012-0056-x.

2. K. I. Öberg and E. A. Bergin. Astrochemistry and compositions of planetary systems. *Physics Reports*, 893, 1–48. (2021). doi:10.1016/j.physrep.2020.09.004.
3. Cui, J., Yelle, R. V., Vuitton, V., Waite, J. H., Kasprzak, W. T., Gell, D. A., Magee, B. A. Analysis of Titan's neutral upper atmosphere from Cassini Ion Neutral Mass Spectrometer measurements. *Icarus*, 200(2), 581–615. (2009). doi:10.1016/j.icarus.2008.12.005.
4. Imanaka, H., & Smith, M. A. Formation of nitrogenated organic aerosols in the Titan upper atmosphere. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107(28), 12423–12428. (2010). doi:10.1073/pnas.0913353107.
5. Anderson, C. M., Samuelson, R. E., Yung, Y. L., & McLain, J. L. Solid-state photochemistry as a formation mechanism for Titan's stratospheric C₄N₂ ice clouds. *Geophysical Research Letters*, 43(7), 3088–3094. (2016). doi:10.1002/2016gl067795.
6. G. R. Gladstone, S. A. Stern, K. Ennico, C. B. Olkin, H. A. Weaver, L. A. Young, M. E. Summers, D. F. Strobel, D. P. Hinson, J. A. Kammer, A. H. Parker, A. J. Steffl, I. R. Linscott, J. W. Parker, A. F. Cheng, D. C. Slater, M. H. Versteeg, T. K. Greathouse, K. D. Retherford, H. Throop, N. J. Cunningham, W. W. Woods, K. N. Singer, C. C. Tsang, E. Schindhelm, C. M. Lisse, M. L. Wong, Y. L. Yung, X. Zhu, W. Curdt, P. Lavvas, E. F. Young, G. L. Tyler, and Team New Horizons Science, *Science* 351.
7. Krasnopolsky, V. A., & Cruikshank, D. P. Photochemistry of Pluto's atmosphere and ionosphere near perihelion. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 104(E9), 21979–21996. (1999). doi:10.1029/1999je001038.
8. M. L. Wong, S. Fan, P. Gao, M. C. Liang, R. L. Shia, Y. L. Yung, J. A. Kammer, M. E. Summers, G. R. Gladstone, L. A. Young, C. B. Olkin, K. Ennico, H. A. Weaver, and S. A. Stern, *Icarus* 287, 110 (2017). doi:10.1016/j.icarus.2016.09.028.
9. V. A. Krasnopolsky, *Icarus* 335, 113374 (2020). doi:10.1016/j.icarus.2019.07.008.
10. X. Gu, Y. S. Kim, R. I. Kaiser, A. M. Mebel, M. C. Liang, Y. L. Yung, Chemical dynamics of triacetylene formation and implications to the synthesis of polyynes in Titan's atmosphere // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* V. 106, – I. 38, – 2009, – P. 16078-16083.
11. Chai J.-D. and Head-Gordon M., Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom-atom dispersion corrections / J.-D. Chai and M. Head-Gordon // *Physics Chemical Journal*. – 2008. – 10. – P.6615–6620.
12. J.-D. Chai and M. Head-Gordon, Systematic optimization of long-range corrected hybrid density functionals / J.-D. Chai and M. Head-Gordon // *Physics Chemical Journal*. – 2008. 128 – 084106.
13. Frisch, M.J. Gaussian 09, revision B.01 / M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel et al. // Gaussian, Inc.: Wallingford, CT. – 2010.

Сведения об авторах

Крикунова Любовь Ивановна, аспирант Самарского университета. Область научных интересов: физика, астрономия, химия, математика.

Порфирьев Денис Петрович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики. Область научных интересов: физика, астрономия, химия, компьютерные науки, химическая инженерия, материаловедение, математика.

Аязов Валерий Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики. Область научных интересов: физика, химия, астрономия, химическая инженерия, материаловедение.

REACTION PRODUCTS OF ACETONITRILE HC₃N WITH METHINE RADICAL CH IN THE INTERSTELLAR MEDIUM

Krikunova L.I.¹, Porfirev D.P.^{1,2}, Azyazov V.N.^{1,2}

¹Samara National Research University, Samara, Russia, lubov_markova@inbox.ru

²Physical Institute named after P.N. Lebedeva, Samara, Russia

Keywords: potential energy surface, astrochemistry, quantum mechanics.

The acetonitrile with methylidyne reaction is investigated. The reaction is of the importance in astrochemistry at low temperatures. Under such conditions, the molecules interaction with the formation of aromatic compounds can lead biologically important molecules formation. The study of formation mechanisms of linear and cyclic hydrocarbons has an important role in physical and theoretical chemistry since the hydrocarbons is potential precursors of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in space conditions.