Miért van szükség elméleti számításokra az asztrokémiai kutatások során?

Keresztes Barbara

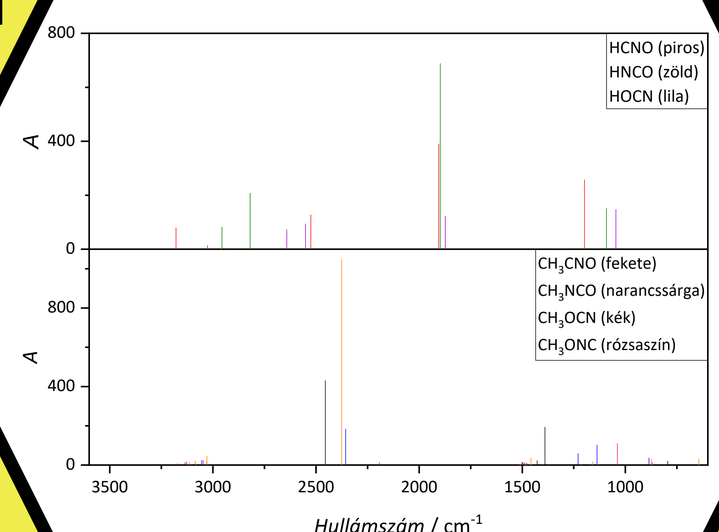
Témavezetők: Dr. Tarczay György, Dr. Góbi Sándor

MTA-ELTE Lendület Laboratóriumi Asztrokémia Kutatócsoport

Az **asztrokémia** a csillagközi teret felépítő részecskék azonosításával, azok kialakulásával és a köztük végbemenő kémiai reakciókkal foglalkozó tudományág. A hatalmas világegyetem részecskéinek távolról, a Föld közeléből elvégzett azonosítása **spektroszkópiai módszerekkel** és **laboratóriumi kísérletek** elvégzésével lehetséges.

Ahhoz, hogy a csillagközi tér vizsgálata, illetve a laboratóriumi kísérletek elvégzése során felvett spektrumokat elemezni, az egyes részecskéket azonosítani lehessen, elengedhetetlen az **elméleti számítások** elvégzése. Ennek során meghatározható, hogy egy molekula milyen hullámhosszú fény elnyelésére, illetve kibocsátására képes. Ezzel minden részecske esetén meghatározható egy-egy rá jellemző, egyedi színkép. Ezeket az **elméleti spektrumokat** összehasonlítva a **kísérleti színképekkel** azonosíthatók a molekulák.

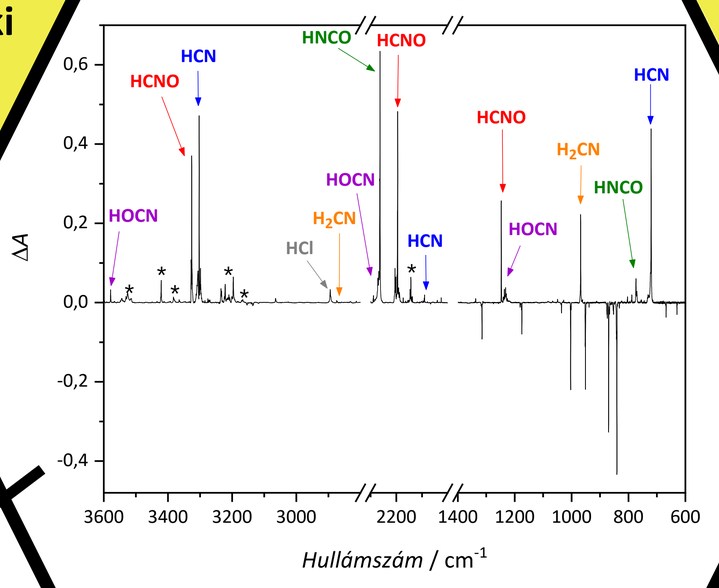
elméleti spektrum



1. ábra. **A [H, C, N, O] és a [CH_3, C, N, O] izomerek elméleti spektrumai. (B3LYP/cc-pVTZ)**

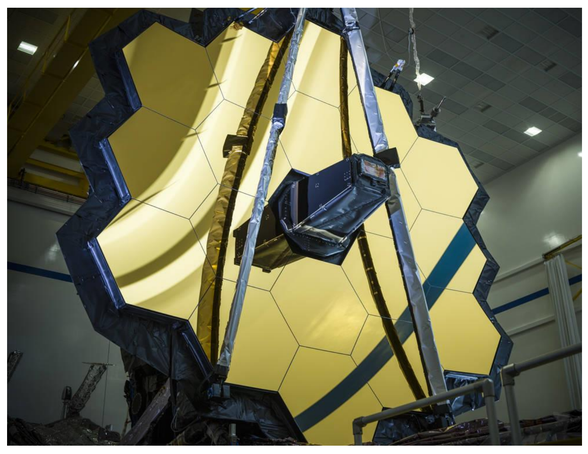
Kutatásunk során a [H, C, N], [H, C, N, O], [CH_3, C, N] és [CH_3, C, N, O] izomerek **elméleti rezgési frekvenciaértékeit** határoztuk meg. Ezeket összehasonlítottuk a különböző kísérletek során kapott spektrumok rezgési frekvenciaértékeivel, így határoztuk meg, hogy **milyen részecskék alakultak ki az egyes kémiai reakciók során**.

laboratóriumi spektrum



2. ábra. **Egy kísérlet során kapott spektrum az azonosított részecskék feltüntetésével.**

csillagközi térről felvett spektrum



3. ábra. **A James Webb Űrteleszkóp.**
(https://www.nasa.gov/press-release/)

Az elméleti számítások elvégzése tehát elengedhetetlen az asztrokémiai vizsgálatokban, mert segítik az egyes kísérletek során kialakult részecskék azonosítását, a kísérletek során lejátszódott kémiai reakciók meghatározását. **Az elméleti számítások közvetett úton hozzájárulnak a csillagközi tér részecskéinek azonosításához, világegyetemünk pontosabb megismeréséhez.**

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.