

**САМООРГАНИЗАЦИЯ, КАТАЛИЗ И ПРОЦЕССЫ ХИМИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ
В ГРАВИТАЦИОННО И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ НЕУСТОЙЧИВЫХ СИСТЕМАХ,
МОДЕЛИРУЮЩИХ РАННИЕ ЭТАПЫ ФОРМИРОВАНИЯ ЗЕМЛИ.
ПРОЕКТ № 148**

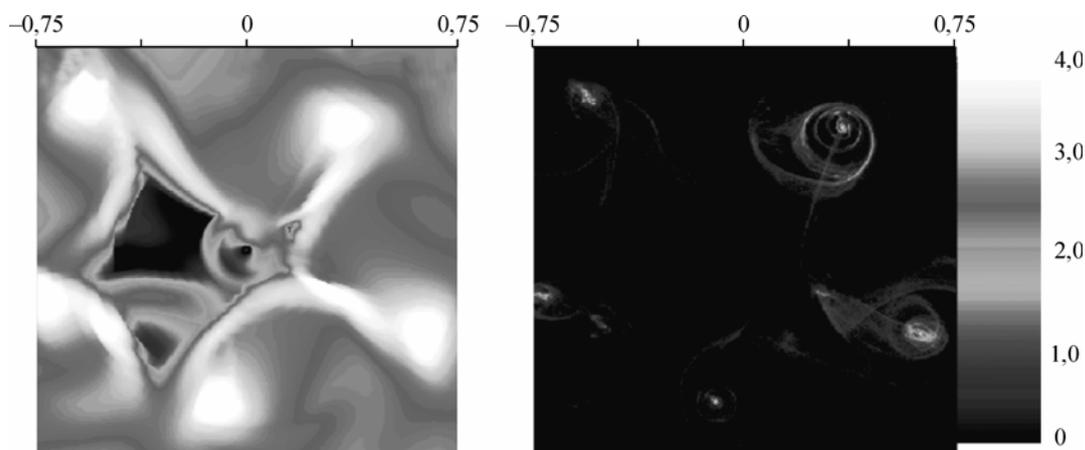
Координатор: акад. РАН Пармон В. Н.

Исполнители: ИК, ИЦиГ, ОИГГМ, ИВТ, ИЯФ, ИВМиМГ, ИБФ, МТЦ СО РАН

По гипотезе «астрокатализа» проблема абиогенного синтеза органического вещества в происхождении жизни на Земле и проблема формирования планет в околозвездном диске тесно связаны между собой. Нелинейная динамика волн в диске могла повлиять на его эволюцию, условия формирования планет и термодинамические параметры для синтеза органических соединений. Созданы математические модели и программы для учета коагуляции и химических процессов в диске для воссоздания первых миллионов лет формирования Земли. Разработаны нестационарные и полностью пространственно трехмерные коды для изучения многофазной среды околозвездных дисков. Проведены вычислительные эксперименты по исследованию гравитационных неустойчивостей с образованием сгустков ве-

щества, демонстрирующих процесс формирования планет (см. рисунок). Выяснилось, что имеется механизм сравнительно быстрого, за время порядка 10 лет, развития первичных сгущений вещества, являющихся зародышами будущих планетезималей в газопылевом аккреционном диске с параметрами протопланетного диска нашей Солнечной системы. Методом лазерного испарения вещества метеоритов и земных пород получены наноматериалы, каталитическая активность которых измерена в химических реакциях с простыми соединениями углерода и, в том числе, в синтезе углеводородов для предполагаемых условий формирования планет.

Исследованы принципы эволюции на химической стадии, в частности, среди автокаталитических реакций. Примером таких реакций



Формирование планет в околозвездном диске при гравитационной неустойчивости. Распределение логарифма плотности газа (слева) и пыли (справа). Моделирование на суперкомпьютере.

Planets formation in circumstellar disks upon gravitational instability. Distributions of logarithm density of gas (left) and particles (right). Supercomputer simulation.

является «формозная» реакция Бутлерова, в которой из формальдегида (ФА) синтезируется, среди прочего, рибоза. Рибоза входит составной частью в важнейшие молекулы химической предыстории жизни — РНК, ДНК, АТФ. Предложен и исследован процесс конденсации ФА с низшими углеводами в нейтральной среде в присутствии фосфатсодержащих гетерогенных (гидроксиапатит $\text{Ca}_5(\text{OH})(\text{PO}_4)_3$ и природные минералы апатит $\text{Ca}_5(\text{OH}, \text{Cl}, \text{F})(\text{PO}_4)_3$ и вивианит $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$) и гомогенных (фосфатный буфер) катализаторов.

Разработан комплекс программ «Эволюционный конструктор» (ЭК) для моделирования популяционно-генетических процессов в группе популяций одноклеточных организмов. Выяснилось, что средствами ЭК, в частности, могут быть смоделированы системы типа гиперциклов или сайзеров. Также выяснилось, что при ингибирующем взаимодействии метапопуляция разбивается на отдельные кластеры, иногда развивающиеся циклически. При моделировании горизонтального переноса генети-

ческого материала селекционное преимущество получала популяция-акцептор.

Показано, что эволюционные изменения автокаталитических систем в замкнутой проточной системе (с использованием проточных реакторов идеального перемешивания) не могут протекать независимо. При предположении низкой скорости дезинтеграции веществ автокаталитических систем естественный отбор будет давать преимущества автокаталитическим системам, обладающим большей скоростью автокатализа при низких концентрациях химических реагентов.

Таким образом, ведущие гипотезы, заложенные в основу исследований по интеграционному проекту, обеспечивают дополнительный прогресс в обосновании и понимании абиогенных стадий синтеза первичных органических соединений вплоть до «мира РНК». Кроме того, найдены новые системы, перспективные для исследований в области науки о предбиологических стадиях зарождения жизни.

Основные публикации

1. Снытников В. Н., Вишивков В. А., Кукишева Э. А. и др. Трехмерное численное моделирование нестационарной гравитирующей системы многих тел с газом// Письма в астрономический журнал. 2004. Т. 30, № 2. С. 146—160.
2. Снытников В. Н., Пармон В. Н. Жизнь создает планеты?// Наука из первых рук. 2004. Т. 0. С. 20—31.
3. Nikitin S. A., Snytnikov V. N., Vshivkov V. A. Magnetic fields in protoplanetary and galactic disks// Plasma in the Laboratory and in the Universe. AIP Conf. Proc. 2004. V. 703. P. 284—287.
4. Снытников В. Н., Стояновский В. О., Пармон В. Н. Лазерно-индуцированная люминесценция оксидных катализаторов, возбуждаемая излучением ArF-лазера// Кинетика и катализ. 2005. Т. 46, № 2. С. 278—287.
5. Кукишева Э. А., Снытников В. Н. Параллельная реализация фундаментального решения уравнения Пуассона// Вычисл. технологии. 2005. Т. 10, № 4. С. 63—71.
6. Kuksheva E. A., Malyshkin V. E., Nikitin S. A. et al. Supercomputer simulation of self-gravitating media// Future Generation Computer Systems. 2005. V. 21. P. 749—757.
7. Вишивков В. А., Снытников В. Н., Черных И. Г. Использование современных информационных технологий для численного решения прямых задач химической кинетики// Вычислительная математика и программирование. 2005. Т. 6. С. 71—76.
8. Pestunova O., Simonov A., Stoynovsky V. et al. Formation of sugars on prebiotic Earth initiated by UV-radiation// Adv. Space Res. 2005. V. 36/2. P. 214—219.