

**Радиолиз молекулы воды**

Малашенко А.Г.<sup>1</sup>, студ.; Лопаткин Ю.М.<sup>1</sup>, проф.;  
Кондратенко П.А.<sup>2</sup>, проф.

<sup>1</sup> Сумский государственный университет, г. Сумы

<sup>2</sup> Национальный авиационный университет, г. Киев

Используя моделирование процессов в молекуле пероксида водорода и квантово-химические расчёты, в работе:

– показано, что радиолиз воды (энергия возбуждения выше 10 эВ) приводит к гомолитической диссоциации  $\text{H}_2\text{O}$  (с образованием радикалов  $\text{OH}$  и  $\text{H}$ ) с высоким квантовым выходом вследствие того, что нижнее триплетное состояние является диссоциативным;

– дан анализ молекулярных орбиталей молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  и их роль в наблюдаемых процессах.

Молекула воды – это высокосимметричная молекула (симметрия  $\text{C}_{2v}$ ). Дипольный момент  $d$  молекулы воды направлен по биссектрисе угла  $\text{HOH}$ , т.е. вдоль оси симметрии  $\text{C}_2$ .

Молекулярные орбитали (МО)  $\text{H}_2\text{O}$  сформированы из двух  $1s$ -АО водорода, а также одной  $2s$ -АО и трех  $2p$ -АО кислорода. 3 6 энергетических уровней 4 заполнены электронами, причём четвёртая представлена несвязующей МО. Квантовый переход между МО № 3 и № 5 переводит молекулу воды в  $\text{S}_3$ - или  $\text{T}_3$ -состояния, последнее из которых является диссоциативным. Следовательно, радиационное возбуждение молекулы воды будет вызывать её диссоциацию.

При радиационном облучении воды можно перевести молекулу в высоковозбуждённое состояние. При релаксации молекулы из этого состояния возможно заселение диссоциативного триплетного состояния  $\text{T}_3$ , в результате чего образуются две парамагнитные частицы со спином  $1/2$ .

Интересно в этом плане отметить, что с удлинением  $\text{O-H}$ -связи дипольный момент молекулы увеличивается, и положительный заряд на атоме водорода сначала возрастает, достигая максимальной величины порядка  $+0,3 e$ , после чего уменьшается до нуля. Следовательно, в результате диссоциации образуются радикалы  $\text{OH}$  и  $\text{H}$ .

В дальнейшем рекомбинация образовавшихся радикалов приведёт к образованию молекул  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$ .