

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ :: 2013

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 22-27 квітня 2013 року)

Суми
Сумський державний університет
2013

Энергетическая структура и механизм диссоциации молекулы пероксида водорода

Малашенко А.Г.,¹ студ.; Сакун Т.Н.,² ассист.;
Кондратенко П.А.,² проф.; Лопаткин Ю.М.,¹ проф.

¹ Сумский государственный университет, г. Сумы
² Национальный авиационный университет, г. Киев

Почему молекула пероксида водорода медленно, но распадается при комнатной температуре? Для ответа на этот вопрос необходимо было исследовать энергетическую структуру молекулы. Для расчётов были использованы методы молекулярной динамики, а также полуэмпирический квантово-механический метод AM1, давший при анализе результатов применения различных полуэмпирических методов наиболее близкие результаты к уже известным полученным экспериментальным результатам.

Молекула H_2O_2 обладает симметрией C_2 . Ось второго порядка направлена вдоль дипольного момента (дипольный момент 1.4272 D). Двугранный угол HOOH равен $125,49^\circ$ и уменьшается в водных растворах. Такую пространственную структуру можно объяснить расположением молекулярных орбиталей в молекуле.

В работе исследована энергетическая структура молекулы. Обнаружена необычная конфигурация потенциальных поверхностей: уже первые возбуждённые состояния оказались диссоциативными. Из теоретико-группового рассмотрения следует, что должны иметь место 4 полносимметричных (A_1) колебания и 2 антисимметричных (A_2) колебания, что соответствует расчётам ИК спектра в данной работе. Симметричные колебания z-поляризованные, а антисимметричные – в плоскости xy.

Показано, что спонтанный распад молекулы можно объяснить наличием взаимодействия молекулы H_2O_2 с радикалом OH^* , а также с атомами (катализаторами), способными осуществить перенос протона в молекуле H_2O_2 . Фотодиссоциация молекул H_2O_2 обусловлена наличием диссоциативных потенциальных поверхностей, каковыми оказались первые возбуждённые синглетное и триплетное состояния.