

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

О взаимодействии ртути с озоном

Клименко Д.А, студ.; Шовкопляс О.А., ст. преп.;
Лопаткин Ю.М., проф.

Сумский государственный университет, г. Сумы

При взаимодействии ртути с озоном у неё исчезает металлический блеск, и она начинает прилипать к стеклу. Для объяснения этого явления были проведены расчёты с использованием полуэмпирических квантово-механических методов AM1, PM3 и MNDO/d с учётом конфигурационного взаимодействия. В результате взаимодействия озона с ртутью возможно как окисление ртути, так и образование слабого ($E_{св} = 50,04$ ккал/моль) комплекса в триплетном состоянии (рис.1), поглощающего в синей и УФ-области (табл.1).

Таблица 1 – Электронный спектр поглощения комплекса O_3-Hg

Длина волны λ , нм	447,41	399,36	287,42	216,10	198,76
Сила осциллятора f	0,042	0,339	0,060	0,003	0,009

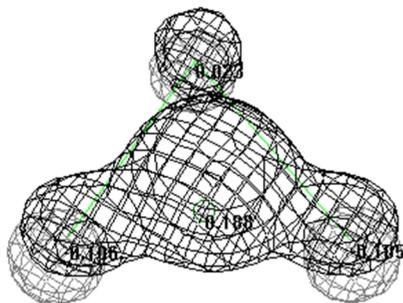


Рис.1 – Молекулярные орбитали и распределение электрического заряда в комплексе ртути и озона

Известно, что в состав стекла, кроме SiO_2 , обычно входят также сода Na_2CO_3 и известь CaO . Измерены их дипольные моменты (табл.2).

Таблица 2 – Дипольные моменты исследуемых соединений

Соединение	Комплекс O_3-Hg	Hg_2O	CaO	Na_2CO_3
Дипольный момент, D	3,512	1,099	6,039	9,060

Прилипание к стеклу объясняется диполь-дипольным взаимодействием между молекулами стекла и вновь образовавшимися молекулами закиси ртути и комплекса ртути с озоном.