

УДК 539.2

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ОБЩЕЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ОРБИТАЛЕЙ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ МОЛЕКУЛЫ ОЗОНА И АТОМА КИСЛОРОДА

Галимова Г. Р., Аязов В. Н.

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика
С. П. Королёва (национальный исследовательский университет), г. Самара

Фотохимические процессы с участием синглетного кислорода ($O_2(a^1)$), атомов кислорода и озона являются критическими в определении концентрации атмосферного озона. В данной статье мы рассматриваем изменения общей кинетической энергии орбиталей, происходящие при столкновении молекулы озона O_3 с атомом O . Исследование производилось с изменением угла подлёта атома O . Угол менялся от 50 градусов, до 150 градусов с шагом в 5 градусов. Для исследования полной энергии системы была использована программа Gaussian 09. Расчёт производился на уровне приближения Хартри-Фока с использованием 6-31G(d) базисного набора. Система содержала закрытую электронную оболочку. Зависимость энергии от угла выглядит показана на рисунке 1.

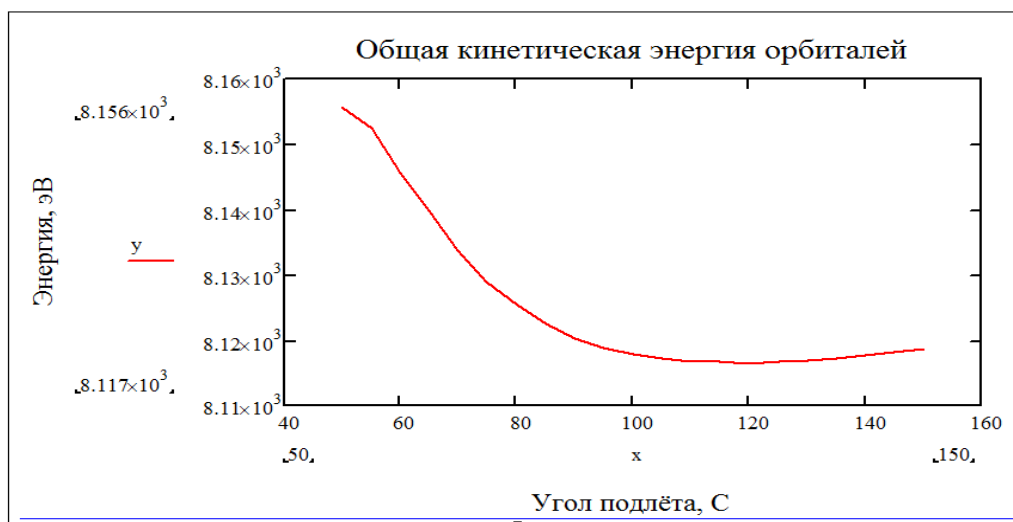
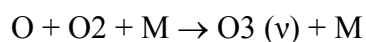


Рис. 1.

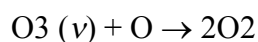
Из рис. 1 видно, что общая кинетическая энергия системы резко уменьшается до достижения отметки 120 градусов, далее энергетическая кривая начинает возрастать.

По этой кривой можно считать колебательные уровни для кислорода в разных электронных состояниях.

Нам известно, что колебательно-возбужденный озон формируется



и эффективно взаимодействует с $O_2(a^1\delta)$ и атомами кислорода. Реакция



удаляет две нечётные формы кислорода, в результате чего происходит неполное восстановление озонового слоя.

Возможно влияние этих реакций на атмосферном уровне.