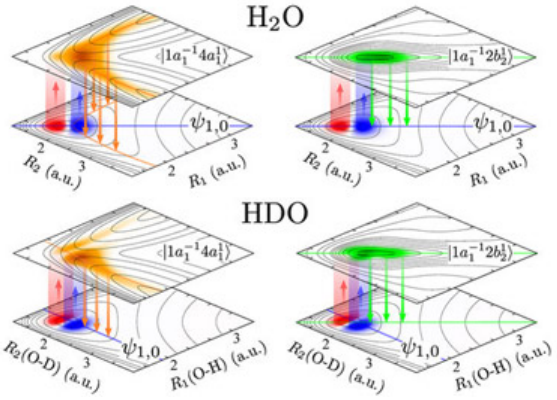
Квантовые вычисления выявили новые свойства «тяжёлой воды»



В одном из самых авторитетных мировых научных журналов «Scientific Reports» (входит в «Nature Publishing Group») опубликованы результаты двухлетних фундаментальных исследований о новых свойствах воды. Они имеют высокое значение для изучения свойств материалов и для управления химическими реакциями важнейшего элемента на Земле. Прикладное значение заключается в изучении процессов переноса энергии в конденсированных средах и разработке механизмов контроля фотостимулированных химических реакций. Это является важным шагом на пути к понимаю структуры жидкой воды.

Британское издание в марте 2017 года уделило внимание работе группы учёных из Сибирского федерального университета, которые проводят эксперименты в коллаборации с ведущими сотрудниками Королевского технологического института (Стокгольм, Швеция). В её международный состав вошли профессор Фарис Гельмуханов и доктор наук Виктор Кимберг (Швеция), а также красноярский физик Сергей Полютов и его аспиранты Нина Игнатова и Андрей Зимин.

Главным направлением их сотрудничества являются исследования по рентгеновской спектроскопии воды. Как объясняют физики актуальность своих разработок, молекулярная симметрия является одним из важных свойств квантовой и классической физики. Исследователи уверены: обнаруженное «сосуществование» локализованных и делокализованных колебаний в молекуле является исключительно важным в исследованиях миграции колебательных возбуждений в твёрдых телах и жидкостях.

> *«Например, симметрия известной молекулы воды — H-O-H — отражается на её колебаниях,* — рассказывает **Фарис Гельмуханов**. — *Колебания атомов водорода делокализованы — в том смысле, что атомы водорода колеблются одновременно. Есть два типа колебаний. В одном из них атомы совершаются симметричные колебания, синхронно удаляясь или приближаясь к центральному атому кислорода. Атомы совершают также антисимметричные колебания: в этом случае они двигаются в одну сторону. Так создаётся единое целое относительно атома кислорода. Но картина качественно меняется при нарушении симметрии, если заменить один из атомов водорода (H) его изотопом — атомом дейтерия (D)».*

Напомним, что изотоп отличается от атома ядром, которое содержит теперь помимо положительно заряженного протона нейтральную частицу — нейтрон — с аналогичной массой, что и атом водорода. В результате получается молекула так называемой «тяжёлой воды». Её формула — H-O-D, она несимметрична, поскольку изотоп почти в два раза тяжелее атома водорода. А связи OH и OD уже не являются эквивалентными: «лёгкий» H-атом и «тяжёлый» D-атом колеблются независимо и с разными частотами.

> *«Другими словами, колебания становятся локализованными на OH- или OD-связях. Этот факт, являясь общепринятым, твёрдо установлен и подтверждён*

многочисленными экспериментами инфракрасной спектроскопии. Важно подчеркнуть: сказанное справедливо лишь для HOD в её основном электронном состоянии», — подчёркивает **Виктор Кимберг**.

Авторы обнаружили, что свойство локализации колебаний нарушается при облучении молекулы рентгеновским излучением. Воздействие переводит молекулу HOD в высоковозбуждённое электронное состояние, где водород и дейтерий колеблются опять синхронно как в обычной молекуле воды.

Причина этой делокализации колебаний заключается в следующем: как поясняет профессор **Гельмуханов**: *«С точки зрения электростатического взаимодействия, колебания должны быть делокализованными, так как электростатически атомы H и D являются одинаковыми. Действительно, у обоих атомов заряд ядра один и тот же. Другими словами, элетростатическое взаимодействие (электростатический потенциал) в HOD-молекуле симметрично относительно перестановки H- и D-атомов. Молекулярный потенциал HOD-молекулы является точно таким же, как и для HOH-молекулы. Причиной нарушения симметрии является динамика в виде кинетической энергии H- и D-атомов, поскольку „лёгкий“ H-атом двигается быстрее, чем „тяжёлый“ D-атом. Таким образом, локализация или делокализация колебаний зависит от соперничества между симметричным молекулярным потенциалом и асимметричной кинетической энергией. Квантовые расчёты действительно показали: молекулярный потенциал в рентгеновски возбуждённом состоянии настолько силён, что он „перевешивает“ локализирующую роль кинетической энергии».*

Пресс-служба СФУ, 14 апреля 2017 г.

© Сибирский федеральный университет. Редакция сайта: +7 (391) 246-98-60, info@sfu-kras.ru.

Адрес страницы: https://news.sfu-kras.ru/node/18668