



УДК 541.138  
ББК 22.6+24.5

## МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ ПЫЛЕВОЙ ЧАСТИЦЫ МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЫ <sup>1</sup>

*Д.Н. Лебедев, Н.Г. Лебедев*

В работе предложена модель процесса формирования молекул водорода на поверхности пылевой частицы межзвездной среды. В качестве примера пылевой частицы рассмотрен кристаллит оксида кремния. Полуэмпирическими и неэмпирическими методами квантовой химии рассчитаны геометрические характеристики, ультрафиолетовые и инфракрасные спектры пылевых частиц и частиц с адсорбированными на их поверхности атомами водорода. Проведено моделирование элементарного акта синтеза молекулы водорода на поверхности оксида кремния, показана энергетическая выгода данного процесса.

*Ключевые слова:* межзвездная среда, пылевые частицы, квантовая химия, адсорбция, молекулярный водород.

### Введение

Частицам пыли принадлежит центральная роль в физике и химии межзвездной среды (МЗС). Пыль играет важную роль в эволюции межзвездной среды, определяя ее нагрев. Ультрафиолетовое излучение молодых звезд переизлучается пылью в инфракрасном диапазоне, что влияет и на химический состав, поскольку темп химических реакций зависит также от интенсивности ультрафиолетового излучения. Пыль выступает в роли катализатора, отвечая за формирование новых молекул на пылинках. Основным механизмом, которым может быть получен молекулярный водород в необходимых количествах для звездообразования, считается процесс его формирования на межзвездных пылинках [1; 10–13; 15; 16].

Синтез пылевых частиц происходит в атмосферах холодных звезд на заключительном этапе их эволюции. Тип сформированной пыли зависит от отношения обилия углерода к кислороду. Наиболее распространенными пылевыми частицами являются графитовые и силикатные, физико-химические свойства которых достаточно хорошо изучены в физике кристаллов. Силикатные пылевые частицы, как и графитовые, формируются в холодных атмосферах старых звезд, вошедших в стадию красных гигантов. При этом для формирования графитовых пылевых частиц необходимо повышенное содержание углерода в атмосфере звезды [1; 10–13; 15; 16].

Для изучения физических и химических свойств твердых тел разработаны и хорошо зарекомендовали себя молекулярные модели, позволяющие выделить отдельный фрагмент кристалла и изучать его как молекулу. Такой подход в существенной степени акцентирует внимание исследователей на локальных особенностях и свойствах моделируемых объектов, в том числе на природу химической связи в совершенных кристаллах диэлектриков, полупроводников и металлов; спектроскопических характеристиках отдельных дефектов; релаксации кристаллической решетки при появлении примеси; свойствах чистых поверхностей; адсорбции атомов и молекул и т. д. [6; 8; 9].

Молекулярные модели объемных и поверхностных фрагментов кремниевой пылевой частицы предложены в работах [2; 3; 14]. С помощью современных методов квантовой химии в рамках модели молекулярного кластера рассчитаны геометрические характеристики, ультрафиолетовые и инфракрасные спектры пылевых частиц и частиц с адсорбированным на их поверхности атомом водорода.

В данной работе для исследования элементарных химических процессов, происходящих в МЗС, предлагается использовать современные методы квантовой химии, разработанные для изучения геометрии, физико-химических свойств и реакционной способности атомов, молекул и конденсированных сред. Исследованы электронно-энергетические характеристики процесса формирования молекулярного водорода на пылевой частице, в качестве примера которой рассмотрена частица оксида кремния в модификации кварца.

### Молекулярная модель пылевой силикатной частицы

Диоксид кремния  $\text{SiO}_2$  в нормальных условиях стабильно существует в кристаллическом ( $\alpha$ -кварц) и стеклообразном состояниях. Твердый диоксид в обоих состояниях имеет высокую прозрачность в области  $0,3 \div 8,5$  эВ. В кристаллическом состоянии диоксид кремния имеет ряд модификаций. Кристаллическая модификация  $\beta$ -кварца оказывается устойчивой в области температур ниже  $573$  °С, что хорошо реализуется в МЗС. Во всех структурных модификациях атомы кремния имеют тетраэдрическую координацию (группа точечной симметрии  $T_d$ ). Трехмерная решетка кварца построена из кремний-кислородных тетраэдров, соединенных общими вершинами в спиральные цепи, которые завиваются вокруг тригональной оси. Структура  $\alpha$ -кварца относится к тригонально-трапецеэдрическому классу пространственных групп симметрии. Длины химических связей Si-O равны  $1,597$  и  $1,617$  Е, угол Si-O-Si равен  $142$  °. Основные параметры элементарных ячеек кварца:  $a = 4,913$  и  $c = 5,405$  Е. Кремний-кислородный тетраэдр также является основой структуры при переходе диоксида кремния в стеклообразное состояние. В стекле химические связи Si-O имеют длину  $1,62$  Е, а угол Si-O-Si меняется в диапазоне от  $120$  до  $180$  °. Функция распределения углов имеет максимум при  $144$  ° [7].

Отсутствие плотной упаковки и низкие координационные числа атомов в структурах почти всех кристаллических и стеклообразной форм диоксида кремния указывают на высокую ковалентность кремний-кислородной связи. Наличие вариаций валентного угла Si-O-Si в стеклообразном кремнии свидетельствует о смешанном, ковалентно-ионном, характере химической связи. Атом кремния имеет 4 валентных электрона, которые расположены на  $3s$ - и  $3p$ -атомных орбиталях. Тетраэдрическая координация атома предполагает, что в образовании химической связи участвуют в основном  $sp^3$ -гибридные орбитали. Однако изучение спектров эмиссии рентгеновских лучей показало, что в образовании кремний-кислородных связей могут давать ощутимый вклад  $3d$ -орбитали кремния. Атом кислорода образует две  $\sigma$ -связи с соседними атомами кремния. Различные валентные углы в кристаллическом и стеклообразном диоксиде кремния свидетельствуют, что в образовании химических связей участвуют  $s$ - и  $p$ -атомные орбитали кислорода [7].

Таким образом, локализованный характер кремний-кислородных связей в диоксиде кремния, во-первых, относит этот материал к классу диэлектриков, во-вторых, позволяет успешно применять для изучения его физико-химических свойств молекулярные (кластерные) модели [5; 6; 8; 9].

Многочисленные исследования объемных и поверхностных структур как идеального, так и дефектного оксида кремния показали, что для моделирования локальных активных центров достаточно выбрать молекулярный фрагмент кристалла в форме одной элементарной ячейки, состоящей из одного кремний-кислородного тетраэдра, имеющего структурную формулу  $\text{Si}(\text{OH})_4$  (см. рис. 1, а) [6; 9].

В работах [2; 14] построена модель пылевой частицы межзвездной среды на примере оксида кремния. Оказалось, что для дальнейшего построения молекулярной модели поверхности кремниевой пылевой частицы кластер кристалла оксида кремния целесообразно выбрать в виде мо-

лекулы, содержащей два кремний-кислородных тетраэдра, соединенных мостиковым кислородом. Граничные разорванные связи замыкались атомами водорода. В результате молекулярная модель имеет структурную формулу  $O[Si(OH)_3]_2$  и наглядно изображена на рисунке 1, б.

Для моделирования поверхностных активных центров кремниевых пылевых частиц МЗС рассмотрены фрагменты поверхности оксида кремния вида  $(OH)_3SiOSi(OH)_2$ , содержащего один поверхностный атом кремния, и  $O[Si(OH)_2]_2$  (рис. 2) с двумя поверхностными атомами кремния. Полуэмпирическими методами MNDO, PM3, AM1, RM1 [4; 8] и неэмпирическими методами Хартри – Фока в базисах STO-3G, 3-21G, 6-31G и 6-31++G\*\* [4; 8] рассчитаны энергии верхней занятой ( $E_{ВЗМО}$ ) и нижней вакантной ( $E_{НВМО}$ ) молекулярных орбиталей, граница УФ поглощения или ширина запрещенной зоны ( $E_g$ ), заряды на атомах O и Si, длина связи ( $R(Si-O)$ ) и угол связи  $\angle Si-O-Si$  для кластеров  $O[Si(OH)_3]_2$  (табл. 1),  $(OH)_3SiOSi(OH)_2$  (табл. 2) и  $O[Si(OH)_2]_2$ . А также рассчитаны устойчивые геометрические структуры кластеров (рис. 2).

В таблицах приведены экспериментальные данные для сравнения с результатами квантово-химических полуэмпирических и неэмпирических расчетов и выявления наиболее подходящих методов для расчетов той или иной характеристики пылевой частицы МЗС.

Как следует из полученных результатов, методы STO-3G и PM3 дают наиболее близкие к экспериментальному значению потенциалы ионизации  $E_{ВЗМО}$ . Методы 3-21G, 6-31G, 6-31++G\*\* и AM1, RM1 показывают наилучшие значения границы УФ поглощения. Метод 6-31++G\*\* и AM1 – наилучшее значение длины связи Si-O. Методы 6-31++G\*\* – валентного угла Si-O-Si. Как и следовало ожидать, отсутствует универсальный квантово-химический метод, рассчитывающий все характеристики молекулы с необходимой точностью. В дальнейшем необходимо использовать весь спектр выбранных полуэмпирических и неэмпирических методов.

### Молекулярная модель адсорбции атома водорода на силикатной частице

Проведено исследование энергетических характеристик процесса адсорбции атома водорода на активном центре поверхности силикатной пылевой частицы в рамках модели молекулярного кластера с применением неэмпирических и полуэмпирических методов квантовой химии [5; 8].

Полуэмпирическими методами MNDO, PM3, AM1 [4; 8] и неэмпирическими методами Хартри – Фока в базисах STO-3G, 3-21G и 6-31G [4; 8] рассчитаны ширина запрещенной зоны кластера ( $E_g$ ) и ее изменение в результате адсорбции атома водорода ( $\Delta E_g$ ), заряды на атомах H и Si, длина адсорбционной связи ( $R(Si-H)$ ) и энергия адсорбции ( $E_{ads}$ ) кластера со структурной формулой  $(OH)_3SiOSi(OH)_2...H$  (см. рис. 3). Полученные результаты представлены в таблице 3. Ширина запрещенной зоны рассчитана как первая линия УФ спектра электронов кластера, энергия адсорбции – как разница полной энергии кластера  $(OH)_3SiOSi(OH)_2...H$  и исходных частиц: кластера  $(OH)_3SiOSi(OH)_2$  и атома водорода.

Энергия адсорбции, рассчитанная разными методами квантовой химии, лежит в области -4 ч -3 эВ. Отрицательное значение свидетельствует об энергетически выгодном состоянии частицы с адсорбированным атомом водорода.

Величина  $\Delta E_g$  показывает, что в результате адсорбции атомарного водорода происходит сдвиг границы ультрафиолетового поглощения  $E_g$  силикатной частицы в сторону уменьшения длины волны. Данный сдвиг границы УФ поглощения может быть измерен экспериментально.

Рассчитаны колебательные частоты валентных связей ИК-диапазона, относящихся к адсорбированному на поверхности частицы МЗС атому водорода. Как следует из таблицы, частоты колебаний адсорбционной связи  $R(Si-H)$  лежат в узком диапазоне 2300 ч 2400  $cm^{-1}$  и дают дополнительную линию в спектре ИК-излучения, поэтому могут быть определены экспериментально. Интенсивности валентных колебаний, конечно, относительно малы по сравнению со спектром самой частицы МЗС. Однако сами частицы имеют микроскопический размер, поэтому концентрация атомарного водорода на их поверхности может быть значительной для наблюдения данной линии спектра.

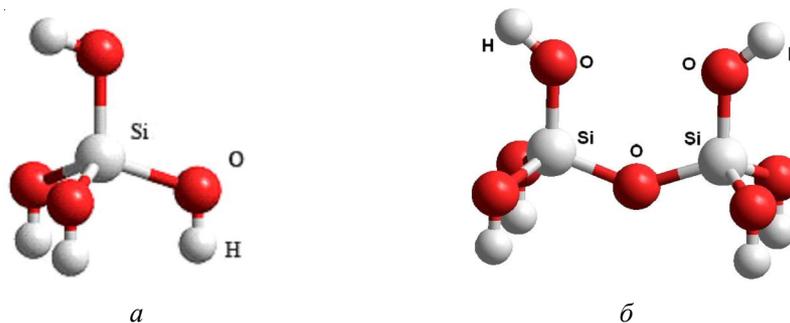


Рис. 1. Модели молекулярных кластеров:  
 $a$  –  $\text{Si}(\text{OH})_4$  и  $b$  –  $\text{O}[\text{Si}(\text{OH})_3]_2$  кристаллита оксида кремния

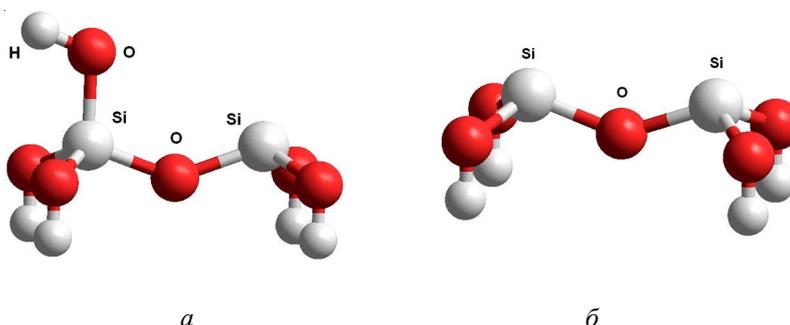


Рис. 2. Модели молекулярного кластера поверхности кристаллита оксида кремния:  
 $a$  –  $(\text{OH})_3\text{SiOSi}(\text{OH})_2$  с атомом Si в качестве поверхностного активного центра;  
 $b$  –  $\text{O}[\text{Si}(\text{OH})_2]_2$  с двумя атомами Si в качестве поверхностного активного центра

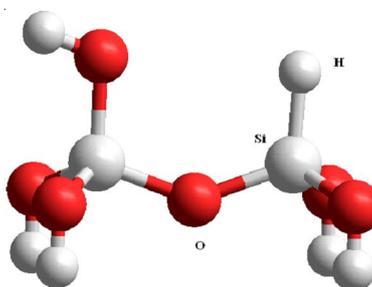


Рис. 3. Кластерная модель поверхности оксида кремния с адсорбированным атомом водорода –  $(\text{OH})_3\text{SiOSi}(\text{OH})_2 \dots \text{H}$

Таблица 1

Электронные и геометрические характеристики молекулярной модели объема кристалла оксида кремния – кластера  $\text{O}[\text{Si}(\text{OH})_3]_2$  (см. рис. 1, б)

Метод	$E_{\text{ВЗМО}}$ , эВ	$E_{\text{НВМО}}$ , эВ	$E_g$ , мкМ	$q(\text{Si})$	$q(\text{O}_n)$	$R(\text{Si}-\text{O})$ , Э	$\angle\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$
STO-3G	-9,34	11,27	0,106	1,37	-0,7	1,63	140,0
3-21G	-13,24	4,88	0,120	1,97	-1,1	1,63	140,5
6-31G	-13,21	4,08	0,118	1,62	-0,9	1,63	140,2
6-31++G**	-13,30	4,53	0,117	1,53	-0,8	1,62	143,0
MNDO	-12,00	1,36	0,206	1,71	-0,9	1,63	140,4
PM3	-10,24	1,76	0,228	1,24	-0,6	1,63	140,1
AM1	-12,26	1,46	0,192	1,80	-1,0	1,64	140,6
RM1	-12,00	1,25	0,198	1,83	-1,0	1,67	178,7
<b>Эксперим.</b>	<b>-9,00</b>		<b>0,139</b>			<b>1,65</b>	<b>143,0</b>

Таблица 2

Электронные и геометрические характеристики модели поверхности – кластера  $(OH)_3SiOSi(OH)_2$  (см. рис. 2, а)

Метод	$E_{ВЗМО}$ , эВ	$E_{НВМО}$ , эВ	$E_g$ , МКМ	$q(Si)$	$q(O_M)$	$R(Si-O)$ , Э	$\angle Si-O-Si$
STO-3G	-6,43	6,02	–	1,04	-0,7	1,63	139,9
3-21G	-9,24	1,96	–	1,5; 2,0	-1,1	1,63	140,2
6-31G	-9,45	2,23	–	1,2; 1,6	-0,9	1,63	140,1
MNDO	-4,67	1,72	0,259	1,7; 1,3	-0,9	1,63	140,0
PM3	-3,72	1,59	0,338	1,2; 0,9	-0,6	1,63	139,8
AM1	-4,26	1,42	0,347	1,8; 1,3	-0,9	1,63	139,9
RM1	-4,08	1,32	0,363	1,8; 1,3	-0,9	1,67	175,0

Таблица 3

Электронные и геометрические характеристики модели поверхности оксида кремния с адсорбированным атомом водорода – кластера  $(OH)_3SiOSi(OH)_2...H$  (см. рис. 3)

Метод	$E_{ВЗМО}$ , эВ	$E_{НВМО}$ , эВ	$E_g$ , МКМ	$DE_g$ , МКМ	$q(Si)$	$q(H)$	$R(Si-H)$ , Э	$E_{ads}$ , эВ	$\nu_{Si-H}(Si-H)$ , см <sup>-1</sup>
STO-3G	-9,26	11,46	0,106	–	1,2	-0,2	1,42	-4,7	2 386,27; 998,33; 913,93
3-21G	-13,2	4,91	0,119	–	1,7	-0,3	1,45	-3,7	2 324,84; 901,47; 745,30
6-31G	-13,19	4,17	0,117	–	1,4	-0,2	1,45	-3,8	2 325,0; 909,08; 843,14
MNDO	-12,17	1,59	0,213	-0,05	1,6	-0,3	1,39	-3,8	2 266,22; 846,17; 841,11
PM3	-9,66	1,63	0,257	-0,08	1,1	-0,1	1,52	-3,1	1 973,61; 760,65; 752,71
AM1	-11,59	1,40	0,231	-0,11	1,6	-0,3	1,45	-3,0	2 183,73; 726,04; 720,15

Модель адсорбции двух атомов водорода на поверхности оксида кремния

Для формирования молекулы водорода на поверхности пылевой частицы предполагается, что в результате процесса диффузии атомов водорода, адсорбированных на поверхности частицы, то есть перескока атомов между соседними поверхностными центрами, происходит их столкновение. Поэтому изучена модель поверхности оксида кремния с адсорбированными двумя атомами водорода на соседних кремниевых центрах. Фрагмент поверхности кремниевой частицы моделировался кластером  $O[H[Si(OH)_2]]_2$  (см. рис. 4).

Полуэмпирическими методами MNDO, PM3, AM1 [4; 8] и неэмпирическими методами Хартри – Фока в базисах STO-3G и 3-21G [там же] рассчитаны величины энергии верхней занятой ( $E_{ВЗМО}$ ) и нижней вакантной ( $E_{НВМО}$ ) молекулярных орбиталей, ширина запрещенной зоны кластера ( $E_g$ ), заряды на атомах H и Si, длина адсорбционной связи  $R(Si-H)$ . Результаты квантово-химических расчетов представлены в таблице 4.

Как следует из таблицы 4, энергия адсорбции двух атомов водорода на соседних поверхностных центрах принимает отрицательные значения, что говорит об образовании устойчивых геометрических структур, и примерно вдвое больше, чем в случае адсорбции одного атома. Это ожидаемый результат, который можно объяснить образованием двух одинаковых адсорбционных связей Si-H. Энергия  $E_{ВЗМО}$  (потенциал ионизации) увеличивается по абсолютной величине по сравнению с адсорбцией одного атома водорода на поверхности кристалла. Это свидетельствует об увеличении реакционной способности такой поверхности.

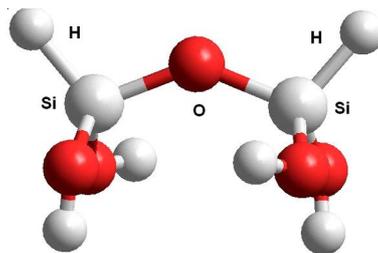


Рис. 4. Кластерная модель поверхности оксида кремния с адсорбированными на соседних центрах атомами водорода –  $O[H[Si(OH)_2]]_2$

Таблица 4

Электронные и геометрические характеристики модели поверхности с адсорбированными атомами водорода – кластера  $O[H[Si(OH)_2]]_2$  (см. рис. 4)

Метод	$E_{ВЗМО}, \text{эВ}$	$E_{НВМО}, \text{эВ}$	$E_g, \text{мкм}$	$q(\text{Si})$	$q(\text{H})$	$E_{ads}, \text{эВ}$	$R(\text{Si-H}), \text{Э}$
STO-3G	-9,3	11,7	0,107	1,2	-0,2	-7,4	1,42
3-21G	-12,6	5,8	0,113	1,8	-0,3	-7,1	1,46
MNDO	-11,5	1,9	0,195	-0,21	0,1	-6,5	1,43
PM3	-10,2	1,3	0,239	1,04	-0,1	-3,2	1,51
AM1	-11,8	0,8	0,215	1,6	-0,3	-3,2	1,43

Квантово-химические расчеты показывают, что граница УФ поглощения  $E_g$  поверхности с двумя адсорбированными атомами водорода смещается в сторону меньших длин волн относительно состояния с одним атомом в среднем на 0,017 мкм. Этот результат можно использовать для экспериментальной идентификации изученного состояния поверхности кремниевой частицы по спектрам УФ-поглощения.

#### Моделирование элементарного акта формирования молекулы водорода на поверхности оксида кремния

Для моделирования элементарного акта формирования молекулы водорода рассмотрен процесс перескока атома водорода с одного поверхностного центра на соседний, уже занятый адсорбированным атомом водорода (рис. 5, а). После перескока проведен квантово-химический полуэмпирический расчет полученной системы с полной релаксацией геометрии в рамках метода MNDO [8]. Результаты расчета показывают формирование молекулы водорода на активном центре поверхности (рис. 5, а) в результате перекрывания атомных орбиталей и дальнейший ее отрыв от поверхности кристалла (рис. 5, б). При этом энергия формирования молекулы  $H_2$  составляет -5,05 эВ, что свидетельствует об образовании энергетически более выгодного состояния. Эта величина более чем в два раза меньше энергии формирования молекулы из двух атомов водорода в газовой фазе через возбужденное состояние ( $\approx 12$  эВ) [1; 10–13; 15; 16].

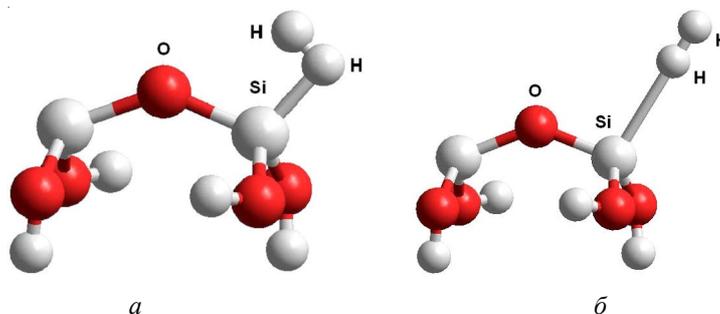


Рис. 5. Модель перескока атома водорода на соседний занятый центр на поверхности  $SiO_2$  (а). Модель формирования молекулы водорода на поверхности  $SiO_2$  (б)

Полученные квантово-химические результаты подтверждают предположение о возможном механизме синтеза молекулярного водорода на поверхности пылевых частиц, выступающих в роли катализатора химической реакции.

### Заключение

1. В работе предложено использовать современные методы квантовой химии и молекулярные модели кристаллов для изучения геометрических, электронно-энергетических и спектральных характеристик пылевых частиц межзвездной среды и моделирования элементарного акта синтеза молекулы водорода на поверхности кремниевой пылевой частицы межзвездной среды.

2. Полуэмпирическими и неэмпирическими методами квантовой химии в рамках модели молекулярного кластера с граничными псевдоатомами изучено электронное строение объемных фрагментов кремниевой пылевой частицы. Рассчитаны геометрические параметры ее устойчивой структуры. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

3. Предложены молекулярные модели поверхности кремниевой пылевой частицы, содержащие один и два соседних поверхностных активных кремниевых центра. Полуэмпирическими и неэмпирическими методами квантовой химии изучено электронное строение выбранных кластеров.

4. Методами квантовой химии рассчитаны электронное строение, геометрические характеристики, УФ- и ИК-спектры молекулярного фрагмента поверхности оксида кремния с адсорбированным атомом водорода. Рассчитанная величина энергии адсорбции свидетельствует об устойчивой геометрической структуре системы.

5. Полуэмпирическими и неэмпирическими методами квантовой химии в рамках модели молекулярного кластера с граничными псевдоатомами изучено электронное строение фрагментов кремниевой пылевой частицы с двумя атомами водорода, адсорбированными на соседних поверхностных центрах. Рассчитаны геометрические параметры ее устойчивой структуры.

6. Предложены молекулярные модели элементарного акта формирования молекулы водорода на поверхности кремниевой пылевой частицы. Полуэмпирическим методом MNDO рассчитана энергия процесса синтеза, которая существенно меньше энергии формирования молекулы в газовой фазе через возбужденное состояние атомарных реагентов.

Авторы выражают искреннюю благодарность Ю.А. Щекинову (ЮФУ), А.М. Соболеву (УрГУ) и И.Г. Коваленко (ВолГУ) за постановку задачи и плодотворное обсуждение результатов исследования.

### ПРИМЕЧАНИЕ

<sup>1</sup> Работа проведена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы [проект № НК-21(7)].

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бочкарев, Н. Г. Основы физики межзвездной среды : учеб. пособие / Н. Г. Бочкарев. – Изд. 2-е. – М. : ЛИБРОКОМ, 2010. – 352 с.

2. Лебедев, Д. Н. Молекулярная модель процесса взаимодействия пылевых частиц с атомом водорода / Д. Н. Лебедев, Н. Г. Лебедев // Тр. 38-й Междунар. студ. науч. конф. «Физика космоса», г. Коуровка, 2–6 февр. 2009 г. – Коуровка, 2009. – С. 305.

3. Лебедев, Н. Г. Применение методов квантовой химии для моделирования процессов газопылевой трансформации межзвездной среды / Н. Г. Лебедев // Тр. 38-й Междунар. студ. науч. конф. «Физика космоса», г. Коуровка, 2–6 февр. 2009 г. – Коуровка, 2009. – С. 89–104.

4. Лебедев, Н. Г. Методы квантовой химии для исследования электронного строения молекул и кристаллов : учеб. пособие : в 3 ч. Ч. 1. Метод Хартри – Фока / Н. Г. Лебедев. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – 116 с.

5. Лебедев, Н. Г. Методы квантовой химии для исследования электронного строения молекул и кристаллов : учеб. пособие : в 3 ч. Ч. 2. Кластерные модели твердых тел / Н. Г. Лебедев, А. О. Литинский. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – 108 с.
6. Модели процессов в широкощелевых твердых телах с дефектами / Ю. Р. Закис, Л. Н. Канторович, Е. А. Котомин [и др.]. – Рига : Зинатне, 1991. – 382 с.
7. Силинь, А. Р. Точечные дефекты и элементарные возбуждения в кристаллическом и стеклообразном SiO<sub>2</sub> / А. Р. Силинь, А. Н. Трухин. – Рига : Зинатне, 1985. – 244 с.
8. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Н. Ф. Степанов. – М. : Мир, 2001. – 519 с.
9. Эварестов, Р. А. Молекулярные модели точечных дефектов в широкощелевых твердых телах / Р. А. Эварестов, Е. А. Котомин, А. Н. Ермошкин. – Рига : Зинатне, 1983. – 287 с.
10. Dyson, J. E. The physics of the interstellar medium / J. E. Dyson, D. A. Williams. – 2nd ed. – Bristol and Philadelphia : Institute of Physics Publishing, 1997. – 171 p.
11. Esteban, C. Cosmochemistry. The melting pot of the elements / C. Esteban, R. J. Garcia-Lopez, A. Herrero, F. Sanchez. – Cambridge : Cambridge University Press, 2004. – 298 p.
12. Flower, D. Molecular collisions in the interstellar medium / D. Flower. – Cambridge : Cambridge University Press, 2007. – 187 p.
13. Kruegel, E. The physics of interstellar dust / E. Kruegel. – Bristol and Philadelphia : Institute of Physics Publishing, 2003. – 560 p.
14. Lebedev, N. G. The application of the quantum chemistry methods for modelling the gas-dust transformation processes in the interstar medium / N. G. Lebedev // The international conference «Nonstationary phenomena and instabilities in astrophysics», Volgograd, 8–12 Sept. – Volgograd, 2009. – P. 47–48.
15. Lequeux, J. The Interstellar Medium / J. Lequeux. – Springer, 2004. – 437 p.
16. Whittet, D. C. B. Dust in the Galactic Environment / D. C. B. Whittet. – 2nd ed. – Bristol and Philadelphia : Institute of Physics Publishing, 2003. – 390 p.

**THE MODEL OF MOLECULAR HYDROGEN FORMATION  
ON THE SURFACE OF A DUST PARTICLE  
OF INTERSTELLAR MEDIUM**

*D.N. Lebedev, N.G. Lebedev*

The model of the process of the molecular hydrogen formation on the dust particle surface of interstellar medium has suggested in the paper. Silica crystal has considered as the dust particle. The geometry characters, UV and IR spectra of the dust particles and the particles with hydrogen atoms adsorbed on its surface have calculated by semi-empirical and ab initio methods of the quantum chemistry. The modeling the elementary act of hydrogen molecule synthesis on silica surface has carried out, the energetic advantage has shown.

**Key words:** *interstellar medium, dust particles, quantum chemistry, adsorption, molecular hydrogen.*