

CZU: 547.4:541.6

SCHIMBĂRILE STRUCTURALE ÎN MOLECULELE DE TIP AH_3 ÎN PROCESELE REDOX INDUSE DE PSEUDOEFECTUL JAHN-TELLER

*Iolanta BALAN**Institutul de Chimie al AȘM*

Pseudoefectul Jahn-Teller (PEJT) este folosit pentru raționalizarea modificărilor structurale ale moleculelor de amoniac NH_3 și de metil CH_3 în procesele redox prin analizarea modificărilor în simetria și decalajul energetic dintre stările electronice fundamentale și excitate care controlează cuplarea lor PEJT de-a lungul coordonatei de deformare. Valorile numerice ale constantelor de cuplare vibronică au fost estimate prin intermediul adaptării soluțiilor ecuațiilor seculare la profilurile energetice calculate *ab initio*. Se arată că oxidarea moleculei NH_3 prin îndepărtarea unui electron de pe ultimul orbital molecular ocupat (HOMO) duce la suprimarea PEJT și la restabilirea configurației nucleare planare. Reducerea moleculei CH_3 mărește PEJT, ducând la piramidalizarea sa.

Cuvinte-cheie: *pseudoefectul Jahn-Teller, procese redox, distorsiuni structurale, parametrii vibronici de cuplaj, stări excitate, amoniac, metil.*

STRUCTURAL CHANGES IN AH_3 TYPE MOLECULES IN THE REDOX PROCESS INDUCED BY PSEUDO JAHN-TELLER EFFECT

The Pseudo Jahn-Teller Effect (PJTE) is used to rationalize structural changes in the redox processes of NH_3 and CH_3 molecules by means of analyzing the changes in their symmetry and energy gaps between the ground and lowest excited electronic states that control their PJTE coupling along the distortion coordinates. The numerical values of the vibronic coupling constants were estimated by means of fitting the solutions of the secular equations to the *ab initio* calculated energy profiles. It is shown that oxidation of NH_3 molecule by removing an electron from the high occupied molecular orbital (HOMO) leads to the suppression of the PJTE and to restoration of planar nuclear configuration. Reduction of CH_3 molecule enhances the PJTE, leading to its pyramidalization.

Keywords: *pseudo Jahn-Teller effect, redox processes, distortion, vibronic coupling parameters, excited states, ammonia, carbonyl.*

*Prezentat la 23.06.2017**Publicat: decembrie 2017*