

ТЕРМОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИОНОВ (NH₄⁺)(NH₃)(H₂O)_n И (NH₄⁺)(NH₃)(H₂SO₄)(H₂O)_n

Назаренко Е.С., Марков П.Н., Назаренко К.М., Надыкто А.Б.

Московский Государственный Технологический Университет «Станкин», 127055
Россия, г.Москва, Вадковский пер., д.3а, тел:(499)972-55-00, e-mail:cmr.nazy@gmail.com

В данной работе проведено исследование структурных характеристик и термодинамических свойств ионов (NH₄⁺)(NH₃)(H₂O)_n и (NH₄⁺)(NH₃)(H₂SO₄)(H₂O)_n. Данные ионы широко распространены в приземном слое и формируются вокруг заряженного ядра NH₄⁺. Исследуемые кластеры представляют собой семейство гидратов, сформированных вокруг (NH₄⁺)(NH₃) и (NH₄⁺)(NH₃)(H₂SO₄). Важность исследования данных кластеров связана с тем, что положительно заряженные ионы атмосферного происхождения, как правило, являются «гигроскопичными», притягивая к себе молекулы воды, которые формируют вокруг заряженного ядра оболочку из H₂O (так называемая solvation/microsolvation shell). Гидратация является фундаментальным явлением, которое напрямую влияет на свойства как нейтральных, так и ионных кластеров, формирующихся в многокомпонентных газовых средах природного и техногенного происхождения. Для проведения расчетов был использован функционал плотности Пердью-Вонга PW91PW91 [1] в комбинации с Попловским набором волновых функций 6-311++G(3df,3pd). Данный ТФП метод обеспечивает адекватное описание термодинамических свойств молекул и молекулярных кластеров. Показано, что при типичных атмосферных условиях изучаемые кластеры являются сильно гидратированными, при этом концентрации гидратов довольно сильно зависят от числа гидратации *n*. Другая важная характеристика – сродство H₂SO₄ к (NH₄⁺)(NH₃)(H₂O)_n – также достаточно сильно зависит от числа гидратации. Было проведено сравнение расчетных данных, описывающих сродство H₂SO₄ к (NH₄⁺)(NH₃)(H₂O)_n, с экспериментальными данными [2]. Проведенное сравнение указывает на высокую точность выбранной модели при описании процесса формирования исследуемых молекулярных систем. Показано, что как бинарные, так и трехкомпонентные ионы являются термодинамически стабильными и способными к дальнейшему росту путем присоединения H₂SO₄ и H₂O.

Полученные данные, с высокой точностью описывающие эксперимент, могут применяться для моделирования кинетических процессов формирования молекулярных кластеров в газофазных средах, предсказания с высокой точностью распределения гидратов, а также для исследования фазовых переходов типа газ-кластер-макроскопическая жидкость. Исследования проведены в рамках Государственного Задания (проект 104, Министерство Науки и Образования РФ).

Литература.

1. J. P. Perdew, in Electronic Structure of Solids '91, Ed. P. Ziesche and H. Eschrig (Akademie Verlag, Berlin, 1991) 11.
2. Payzant, J.D.; Cunningham, A.J.; Kebarle, P., Can. J. Chem., 1973, 51, 19, 324