

## ПЕРИОДИЧЕСКИЕ ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ КОНДЕНСАЦИИ ГАЗОВ

Егоров Б.В., Карпиков И.С., Терёшкина К.Б.<sup>1</sup>

МФТИ, Россия, 140180, Жуковский, ул. Гагарина, д. 16, 7(495)5566278,  
boris.egorov@mail.ru

<sup>1</sup>ИХФ РАН, Россия, 119991, Москва, Ленинский просп., д. 38, 7(495)9397539,  
ksenia.tereshkina@gmail.com

В работе предлагается простейшая модель автоколебаний в реакциях ассоциации, которые могут происходить в гомогенном газе при определенных условиях среды [1]. Объектами исследования являются временные колебания концентрации аргона и 5-метилрезорцина, возникающие в начальной стадии кластеризации, учитывающей помимо мономеров простейшие кластеры – димеры и тримеры.

Необходимые для нахождения констант равновесия параметры кластеров (структура кластеров, моменты инерции, энергетические параметры межмолекулярных и внутримолекулярных колебаний) были найдены с помощью квантово-химических расчетов, выполненных в пакете программ FIREFLY (PC GAMESS) [2]. Полученные в результате квантово-химических расчётов константы равновесия реакций образования кластеров были использованы в дальнейшем для нахождения констант образования кластеров при известных константах диссоциации, найденных на основе теории мономолекулярных химических реакций.

Проведённые расчёты дали возможность рассматривать реакции образования и разрушения кластеров в неравновесных условиях. Константы образования и диссоциации простейших кластеров были использованы в дальнейшем при изучении схем реакций начальной стадии ассоциации, предложенных в работе [1].

Были найдены стационарные состояния изучаемых систем, линии локальных бифуркаций, на основании которых построены линии кратности и нейтральности. Также построены фазовые портреты и рассчитаны числовые плотности мономеров, димеров и тримеров молекул газа в условиях автокатализа.

Проведен параметрический анализ для схем реакций ассоциации для абстрактных констант скоростей [1] и для конкретных констант скоростей реакций кластеризации, полученных в данной работе. Было показано, что эти реакции могут носить колебательный характер.

### Литература

1. *Быков В.И.* Моделирование критических явлений в химической кинетике. – М.: КомКнига, 2007. 328 стр.
2. *Грановский А.А.* <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>