

АЛГОРИТМЫ АНАЛИЗА РАСПРЕДЕЛЕНИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛАСТЕРОВ

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

Московский Государственный Технологический Университет «СТАНКИН»
Россия, 127055, г. Москва, Вадковский пер., 1,
Тел.:(+7 499)972-95-00;
E-mail: cmr.nazy@gmail.com

Работа посвящена моделированию формирования молекулярных гидратов серной кислоты при атмосферных условиях. В связи с широкой распространенностью данных соединений исследование представляет большой интерес для физической химии образования новых частиц в атмосфере (NPF), физики конденсированного вещества и микрофизики аэрозолей.

Программно реализованы алгоритмы интервального оценивания параметров распределения молекулярных кластеров для различных внешних условий на основе данных, полученных с использованием приближения сплошной среды [1] и квантовохимических методов, с учетом влияния погрешности исходных данных ΔH , ΔS и результирующей ΔG . С применением разработанного комплекса программ и результатов вычислительных экспериментов, описанных в работе [2], исследована зависимость среднего числа гидратации в широком диапазоне значений относительной влажности и температуры.

Проведено систематическое сравнение результатов, полученных с использованием классической теории нуклеации (CNT), с данными, полученными различными квантовохимическими методами (ТФП PW91PW91/6-311++G(3df,3pd), ab initio RI-MP2/CBS, композитным B3RICC2). Исследована зависимость распределения гидратов от температуры и относительной влажности. Проведена оценка влияния погрешностей термодинамических данных на получаемые результаты. Установлено, что серная кислота становится гидратированной при достижении относительной влажности, равной 30%, при стандартных условиях.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, проект № 1.7706.2017/8.9, и РФФИ, грант № 18-27/РНФ.

Литература.

1. Henschel H. et al. Hydration of Atmospherically Relevant Molecular Clusters: Computational Chemistry and Classical Thermodynamics. // The journal of physical chemistry, №118, 2014, p. 2599–2611.
2. Назаренко Е.С. Особенности моделирования формирования газозатвержденных гидратов в атмосфере. // Естественные и технические науки, № 9, 2017, стр. 83-91.