

СРАВНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ ГАЗОФАЗНЫХ ГИДРАТОВ В АТМОСФЕРЕ

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

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

Проведен комплекс вычислительных экспериментов по определению структуры и свойств газофазных молекулярных кластеров $(\text{H}_2\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})_n$, $n=0-6$ [1]. Проведен конформационный поиск 64 изомеров с использованием комбинаций 15 функционалов плотности и 7 различных наборов базисных функций. Для вычислений свойств кластеров использовался пакет Gaussian 09.

Выявлены и описаны новые коллективные и масштабные эффекты. В частности, установлено, что расположение глобальных и локальных минимумов на шкале свободных энергий Гиббса и связанные с ними энтропийные эффекты могут приводить к достаточно сильной зависимости средней величины дипольного момента ансамбля изомеров от температуры. Показано на примере бинарных кластеров $\text{H}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$, что масштабные эффекты могут быть весьма значительными, а различие в плотности кластеров и соответствующих им макроскопических жидкостей может достигать 15-20%, и с ростом числа гидратации плотность бинарных гидратов $(\text{H}_2\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})_n$ достаточно быстро приближается к макроскопической плотности соответствующего ему раствора.

Показано, что традиционный подход к тестированию методов ТФП и других методов высокого порядка, который основан на сравнении электронных энергий или энтальпий, непригоден для сравнения точности вычисления термодинамических характеристик. Предложена и обоснована новая методика тестирования, основанная на сравнении теоретических и экспериментальных значений энергии Гиббса, которая позволяет осуществлять оптимальный выбор методов для расчета термодинамических свойств кластеров и наночастиц.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, проект № 1.7706.2017/БЧ, и РФФИ, грант № 15-08-4969а.

Литература.

1. Назаренко Е.С. Особенности моделирования формирования газофазных гидратов в атмосфере. // Естественные и технические науки. 2017. №9. с. 83-91.