

УДК 541.515

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОТОННОГО ОБМЕНА В АССОЦИАТАХ ВОДЫ, АММИАКА И МУРАВЬИНОЙ КИСЛОТЫ

Пустолайкина И.А., Курманова А.Ф., Кутжанова К.Ж.

Карагандинский государственный университет имени Е.А.Букетова, Республика Казахстан, г.Караганда, 100028, ул. Университетская, 28

e-mail: irinamorozo@mail.ru

Полуэмпирическим методом AM1 программного комплекса Gaussian-2009 выполнено моделирование реакции протонного обмена в ассоциатах $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2\text{O}$, NH_3-NH_3 , $\text{HCOOH}-\text{HCOOH}$, $\text{H}_2\text{O}-\text{NH}_3$ и $\text{H}_2\text{O}-\text{HCOOH}$. Для всех систем квантово-химически получены стабильные комплексы за счет водородной связи циклического типа (ЦКВС) (рис. 1, а), послужившие в дальнейших расчетах исходным состоянием для моделирования реакции протонного обмена. Поиск переходного состояния (рис. 1, б) выполнен с помощью метода QST2, для расчетов спусков по координате реакции из переходного состояния в сторону реагентов и продуктов реакции применена процедура IRC.

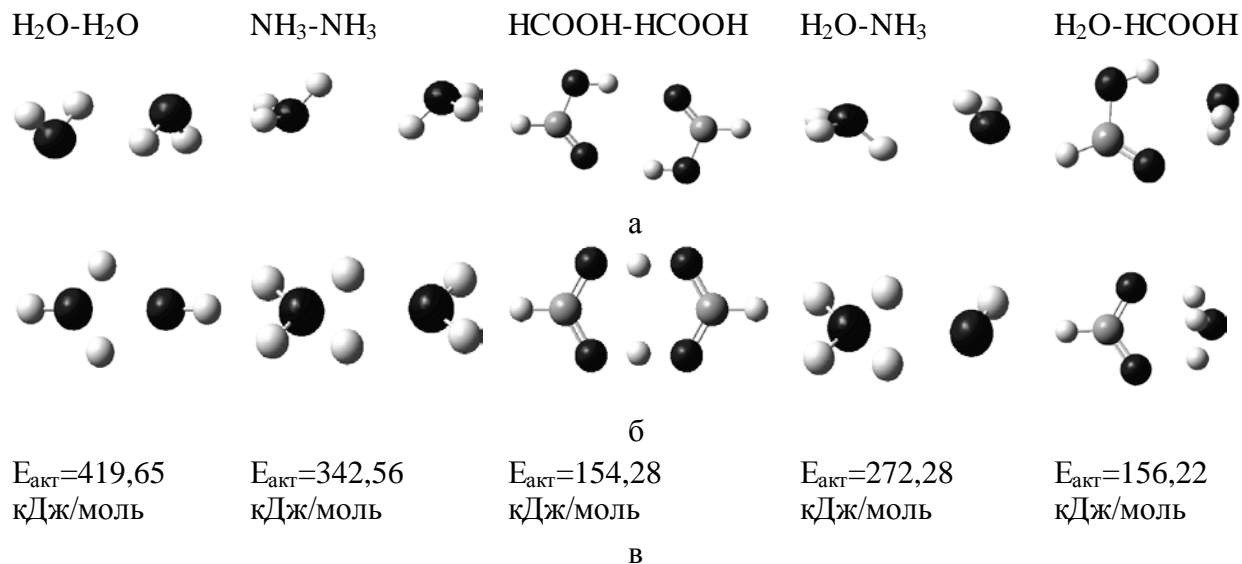


Рис. 1. Геометрическая структура ЦКВС (а) и переходного состояния (б) исследуемых систем

Для исследуемых систем оценены энергия образования ЦКВС и энергия активации реакции обмена протонами внутри ЦКВС (рис. 1, в). Отмечено, что чем больше энергия образования ЦКВС, тем меньше энергия активации реакции протонного обмена.