

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЙ $\Delta_f H_{298,15}^0$ ДЛЯ Al_2O_3 И ЕГО КЛАСТЕРОВ $(\text{Al}_2\text{O}_3)_n$ С $n = 2$ И 4*

Г. А. Поскрёбышев¹, А. Н. Ермаков²

Аннотация: С помощью квантово-механического моделирования, выполненного на B3LYP/6-311++G(d,p) уровне теории, проведен полный и частичный конформационный анализ соответственно для Al_2O_3 и его кластеров с $n = 2$ и 4. На основании этих результатов и расчета энергетики изодесмических реакций определены значения $\Delta_f H_{298,15}^0$ для наиболее термодинамически выгодных конформеров Al_2O_3 и кластеров $(\text{Al}_2\text{O}_3)_n$ с $n = 2$ и 4. Найденные их величины в синглетном состоянии составили: -502 ± 42 ($^1\text{Al}_2\text{O}_3$), -1976 ± 18 ($^1(\text{Al}_2\text{O}_3)_2$) и -4792 ± 23 ($^1(\text{Al}_2\text{O}_3)_4$) кДж/моль. При исследовании принимались во внимания не только синглетные и триплетные состояния этих соединений, но также квинтетные.

Ключевые слова: алюминий; кластер; изодесмическая реакция; энтальпия

Литература

1. Sharipov A. S., Loukhovitski B. I., Starik A. M. Theoretical study of structure and physical properties of $(\text{Al}_2\text{O}_3)_n$ clusters // Phys. Scr., 2013. Vol. 88. P. 058307.
2. Cândido L., Teixeira Rabelo J. N., Da Silva J. L. F., Hai G.-Q. Quantum Monte Carlo study of small aluminum clusters Al_n ($n = 2-13$) // Phys. Rev. B, 2012. Vol. 85. P. 245404.
3. Paranthaman S., Hong K., Kim J., Kim D. E., Kim T. K. Density functional theory assessment of molecular structures and energies of neutral and anionic Al_n ($n = 2-10$) clusters // J. Phys. Chem. A, 2013. Vol. 117. No. 38. P. 9293–9303.
4. Rahane A. B., Deshpande M. D., Kumar V. Structural and electronic properties of $(\text{Al}_2\text{O}_3)_n$ clusters with $n = 1-10$ from first principles calculations // J. Phys. Chem. C, 2011. Vol. 115. No. 37. P. 18111–18121.
5. Burcat A., Ruscic B. Third Millenium Ideal Gas and Condensed Phase Thermodynamical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables, ANL-05/20 and TAE 960 Technion-ITT. — Aerospace Engineering, and Argonne National Laboratory, Chemistry Division, 2011.
6. Afeefy H. Y., Liebman J. F., Stein S. E. “Neutral Thermochemical Data” in NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69 / Eds. P. J. Linstrom, W. G. Mallard. — Gaithersburg, MD, USA: National Institute of Standards and Technology, 2016. <http://webbook.nist.gov>.
7. Li R., Cheng L. Structural determination of $(\text{Al}_2\text{O}_3)_n$ ($n = 1-7$) clusters based on density functional calculations // Comput. Theor. Chem., 2012. Vol. 996. P. 125–131.
8. López-Estrada O., Orgaz E. Theoretical study of the spin competition in small-sized Al clusters // J. Phys. Chem. A, 2015. Vol. 119. No. 49. P. 11941–11948.

Поступила в редакцию 29.12.16

* Благодарность РФФИ (грант № 16-08-00585 А) за поддержку исследования.

¹ Институт энергетических проблем химической физики им. В. Л. Тальрозе Российской академии наук, gposkr@chph.ras.ru

² Институт энергетических проблем химической физики им. В. Л. Тальрозе Российской академии наук, polclouds@yandex.ru