



## Сравнение гидратируемости анионов на основании квантовохимических расчетов

Ткаченко С. В., Котов В. В.

*Воронежский государственный аграрный университет*

### Аннотация

Выполнен квантовохимический расчет *ab initio* равновесных конфигураций молекулярных кластеров  $(\text{H}_2\text{O})_{n+1}$  и ионно-молекулярных кластеров  $\text{X}(\text{H}_2\text{O})_n$  (где  $\text{X} = \text{Cl}^-, \text{NO}_3^-, \text{SO}_4^{2-}, \text{CH}_3\text{COO}^-$ ) для  $n = 1 \dots 12$ . Проанализированы зависимости полных энергий кластеров, а также вычисленных на их основе разностных величин от числа  $n$ . Показано, что средняя энергия присоединения молекулы воды, энергия присоединения кластера  $(\text{H}_2\text{O})_n$ , а также энергия замещения молекулы воды в кластере  $(\text{H}_2\text{O})_{n+1}$  на анион для всех кластеров, кроме  $[\text{SO}_4(\text{H}_2\text{O})_n]^{2-}$ , стабилизируются, начиная примерно с  $n \approx 5 \dots 6$ . Следовательно, для анионов  $\text{Cl}^-, \text{NO}_3^-$  и  $\text{CH}_3\text{COO}^-$  средние числа гидратации не превышают значение 5-6. Начиная с  $n = 6$ , энергия присоединения кластера  $(\text{H}_2\text{O})_n$  к однозарядным анионам колеблется относительно некоторого среднего значения, которое можно рассматривать как количественную характеристику взаимодействия аниона с большим ансамблем молекул растворителя. На основании этого предположения составлен ряд относительной гидратируемости анионов:  $\text{NO}_3^- \leq \text{Cl}^- < \text{CH}_3\text{COO}^- < \text{SO}_4^{2-}$ . Установлено качественное и количественное согласие найденных закономерностей и известных экспериментальных данных по энтальпии и числам гидратации ионов.