

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЙ $\Delta_f H_{298,15}^0$ ДЛЯ КЛАСТЕРОВ $(Al)_n$ С $n = 3-10^*$

Г. А. Поскрёбышев<sup>1</sup>, А. И. Ермаков<sup>2</sup>, В. Б. Сторожев<sup>3</sup>

**Аннотация:** С помощью квантово-механического моделирования рассчитаны значения  $\Delta_f H_{298,15}^0$  для кластеров  $(Al)_n$  с  $n = 3-10$ . Определение  $\Delta_f H_{298,15}^0$ , осуществлялось на основании расчетов термодинамики изодесмических реакций. В результате определены следующие значения:  $551 \pm 16$  ( $n = 3$ );  $668 \pm 8$  ( $n = 4$ );  $720 \pm 16$  ( $n = 5$ );  $769 \pm 9$  ( $n = 6$ );  $776 \pm 29$  ( $n = 7$ );  $853 \pm 32$  ( $n = 8$ );  $931 \pm 33$  ( $n = 9$ ) и  $906 \pm 33$  кДж/моль ( $n = 10$ ).

**Ключевые слова:** алюминий; кластер; изодесмическая реакция; энтальпия

### Литература

1. Li Z. H., Bhatt D., Schultz N. E., Siepmann J. I., Truhlar D. G. Free energies of formation of metal clusters and nanoparticles from molecular simulations:  $Al_n$  with  $n = 2-60$  // J. Phys. Chem. C., 2007. Vol. 111. P. 16227–16242.
2. Afeefy H. Y., Liebman J. F., Stein S. E. Neutral thermochemical data // 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. <http://webbook.nist.gov>.
3. Burcat A., Ruscic B. Third Millennium 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.
4. Li Z. H., Jasper A. W. Structures, rugged energetic landscapes, and nanothermodynamics of  $Al_n$  ( $2 \leq n \leq 65$ ) particles // JACS, 2007. Vol. 129. P. 14899.
5. Chuang F.-C., Wang C. Z., Ho K. H. Structure of neutral aluminum clusters  $Al_n$  ( $2 \leq n \leq 23$ ): Genetic algorithm tight-binding calculations // Phys. Rev. B, 2006. Vol. 73. P. 125431.
6. Zhang R., Zhao Y. Theoretical study on spin polarization in small aluminum clusters // J. Theor. Comput. Chem., 2008. Vol. 7. No. 1. P. 167–176.
7. Alipour M., Mohajer A. Computational insight into the static and dynamic polarizabilities of aluminum nanoclusters // J. Phys. Chem. A, 2010. Vol. 114. P. 12709–12715.
8. Candido 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.
9. 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. P. 9293–9303.
10. Loukhovitski B. I., Sharipov A. S., Starik A. M. Theoretical study of thermochemical properties of  $Al_n C_m$  clusters // Phys. Scripta, 2016. Vol. 70. P. 250.
11. Lopez-Estrada O., Orgaz E. Theoretical study of the spin competition in small-sized Al clusters // J. Phys. Chem. A, 2015. Vol. 119. P. 11941–11948.
12. Zhan C.-G., Zheng F., Dixon D. A. Electron affinities of  $Al_n$  clusters and multiple-fold aromaticity of the square  $Al_4^{2-}$  structure // JACS, 2002. Vol. 124. P. 14795–14803.
13. Schultz N. E., Staszewska G., Staszewski P., Truhlar D. G. Validation of theoretical methods for the structure and energy of aluminum clusters // J. Phys. Chem. B, 2004. Vol. 108. P. 4850–4861.

Поступила в редакцию 29.12.16

\* Исследование было поддержано РФФИ (грант № 16-08-00585 А).

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

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

<sup>3</sup> Институт энергетических проблем химической физики им. В. Л. Тальрозе Российской академии наук, storozhev@chph.ras.ru