

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ГИДРАТАЦИИ ПРОТОНА И ПОТЕНЦИАЛА СТАНДАРТНОГО ВОДОРОДНОГО ЭЛЕКТРОДА

© Кузнецов Андрей Михайлович,^{*+} Шапник Михаил Самойлович,
Маслий Алексей Николаевич и Борисевич Станислав Владимирович

*Кафедра неорганической химии. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. E-mail: am_kuznetsov@kstu.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: метод функционала плотности B3LYP, модель сольватации РСМ, гидратация протона, стандартный потенциал водородного электрода.

Резюме

В рамках метода функционала плотности (версия B3LYP) с использованием молекулярно-континуальной модели сольватации, в которой часть молекул растворителя (воды) включается в расчетную квантово-химическую схему в явном виде, а дальнейшее диэлектрическое окружение учитывается в рамках самосогласованной модели реактивного поля (SCRFP), рассчитаны свободная энергия гидратации протона $\Delta G_{hyd}(H^+)$ и потенциал стандартного водородного электрода (SHE) E_H^0 . Полученные значения $\Delta G_{hyd}(H^+) = -262.2$ ккал/моль и $E_H^0 = -4.42$ В сравниваются с результатами теоретических и экспериментальных оценок, имеющихся в литературе.