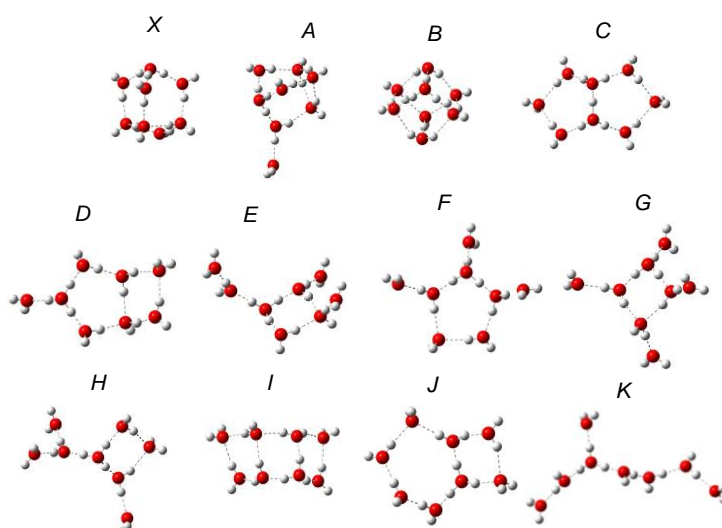


# Eksperymentalne i teoretyczne badania protonowych klastrów wody

Tomasz Wróblewski

*Instytut Fizyki, Akademia Pomorska w Słupsku, ul. Arciszewskiego 22A, 76-200 Słupsk*

Protonowe klasterki wody odgrywają dużą rolę w fizyce i chemii górnych warstw atmosfery, chemii roztworów oraz różnego typu procesach biologicznych [1,2]. W niniejszej pracy wyznaczono entalpie tworzenia klastrów wody na podstawie zależności liczebności zjonizowanych klastrów wody od zredukowanego pola elektrycznego za pomocą kombinacji komory dryfu jonów i kwadrupolowego spektrometru masowego. Przeprowadzono również obliczenia własności energetycznych i widm w podczerwieni różnych konfiguracji geometrycznych jonów  $H^+(H_2O)_n$  z  $n=1-8$  z użyciem metod chemii kwantowej B3LYP/aug-cc-PVDZ oraz CBS-Q.



Rys. 1. Struktury geometryczne jonu  $H^+(H_2O)_8$

Na rys. 1 przedstawiono przykładowe struktury geometryczne klastrów dla  $n=8$  (X oznacza strukturę o najniższej energii). Z porównania wartości eksperymentalnych i obliczeń teoretycznych entalpii reakcji klasteryzacji jonów  $H^+(H_2O)_n$  można wyciągnąć wniosek, że badane doświadczalnie klasterki nie zawsze odpowiadają strukturom o najniższych energiach. Dotyczy to klastrów z  $n \geq 5$ . Ponadto, szczegółowa analiza widm wibracyjnych klastrów sugeruje, że podczas tworzenia się zjonizowanych aglomeratów wody mogą powstawać jednocześnie różne konfiguracje geometryczne o tej samej liczbie cząsteczek wody.

[1] S. Karthikeyan, M. Park, I. Shin, and K.S. Kim, *J. Phys. Chem. A* **112**, 10120 (2008).

[2] J.-Ch. Jiang, Y.-S. Wang, H.-Ch. Chang, S.H. Lin, Y.Y. Lee, G.Niedner-Schatteburg, H.-Ch.Chang, *J.Am.Chem.Soc.* **122**, 1398 (2000).