

**Изучение сравнительной стабильности различных молекулярных форм серы****Федяева Мария Александровна***Студент (бакалавр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

*E-mail: femaal.femaal3@yandex.ru*

В природе самородная сера имеет более 30 аллотропных модификаций. Структурные формирования серы встречаются как в самородном виде, так и в виде включений в полостях минералов, а также в биологических системах [n1]. В связи с важностью серы в природных процессах, мы использовали метод глобальной оптимизации [n2, n3, n4] для нахождения оптимальных структур молекул серы  $S_n$  в широком диапазоне составов ( $n = 2 - 21$ ). Была изучена стабильность молекул с помощью нескольких критериев, включая численно вычисленные вторые производные энергии молекулы по составу ( $\Delta^2 E$ ), энергии фрагментации ( $E_{\text{frag}}$ ) и НОМО-LUMO щели. На основе полученных данных мы определили наиболее устойчивые ("магические") молекулы, которые должны иметь наибольшую стабильность и распространенность. Так, молекула  $S_8$  имеет максимальное значение  $\Delta^2 E$  и образует наиболее распространенную аллотропную форму серы (орторомбическую  $\alpha$ -S), в которую со временем при комнатной температуре переходят все другие модификации [n5]. Другая известная молекула,  $S_7$ , имеет отрицательное значение  $\Delta^2 E$ , но при температурах выше 900 К имеет положительную вторую производную свободной энергии Гиббса по составу ( $\Delta^2 G$ ), что согласуется с экспериментальными данными.

Таким образом, было показано, что рассмотренные параметры ( $\Delta^2 E$  и  $E_{\text{frag}}$ ) являются количественной мерой стабильности, позволяющие предсказать легкость образования молекул и соответствующих молекулярных кристаллов. Температурная зависимость указанных выше показателей устойчивости объясняет широкий круг фактов об аллотропах кристаллов серы, молекулах в газовой фазе и т. Д. Теоретически определенные "магические" кластеры серы играют особую роль в структурной химии и геохимии этого элемента.

**Источники и литература**

- 1) Earnshaw, A. and Greenwood, N.N., 1997. Chemistry of the Elements (Vol. 60). Oxford: Butterworth-Heinemann.
- 2) Lyakhov, A.O. et al. (2013) 'New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX', Computer physics communications, 184(4), pp. 1172–1182.
- 3) Oganov, Artem R., and Colin W. Glass. 2006. "Crystal Structure Prediction Using Ab Initio Evolutionary Techniques: Principles and Applications." The Journal of Chemical Physics 124 (24): 244704.
- 4) Oganov, Artem R., Andriy O. Lyakhov, and Mario Valle. 2011. "How Evolutionary Crystal Structure Prediction Works—and Why." Accounts of Chemical Research 44 (3): 227–37.
- 5) Steudel, R. and Eckert, B., 2003. Solid sulfur allotropes. Elemental sulfur and sulfur-rich compounds I, pp.1-80.