

ДВА ФАСОНА ВОДНОЙ «ОДЕЖДЫ» ИОНОВ: ВОДОПОДОБНЫЙ И МЕТАЛЛОПОДОБНЫЙ

В лаборатории сорбционных методов Института геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского Российской академии наук (ГЕОХИ РАН) предложена модель гидратации ионов, которая базируется на описании структуры водородных связей и особенностей электростатического поля иона на атомных масштабах. Найдены пороговые значения радиусов ионов, для которых гидратация отсутствует. Определены величины емкости гидратных монослоев. Выведены выражения для гидратного числа ионов разного размера, заряда и различающихся способностью к образованию или разрушению водородных связей (т. е. относящихся к классам водоподобных и металлоподобных, соответственно). Сделанные оценки гидратного числа различных катионов и анионов соответствуют экспериментальным величинам в пределах расхождения в их интерпретации. Результаты работы опубликованы в журнале «Сорбционные и хроматографические процессы» (Долгоносов, 2025)*.

На свойства ионных соединений в водных растворах сильно влияет оболочка ионов, состоящая из молекул воды. Часто в химических процессах требуется учитывать не собственные размеры атомов или молекулярных фрагментов, которые приобрели или потеряли один или несколько электронов, а их размеры в «одежде» из молекул воды, прочно притянутых к иону за счет электростатической силы. Оказывается, эта сила не единственная – водородные связи между молекулами воды, которые могут быть дополнительно образованы с центральным ионом или, наоборот, им разрушены, определяют размер и форму гидратной оболочки.

Как известно, в мировой литературе в теме гидратации ионов существует путаница, поскольку экспериментальное число гидратации в общем случае сильно зависит от метода измерения. Имеющиеся в настоящее время теоретические модели не обладают необходимой универсальностью и не могут обойтись без подгоночных параметров. В частности, серьезная трудность в разработке неэмпирического подхода к моделированию явления сolvатации заключается в том, что неизвестно, как диэлектрическая

проницаемость зависит от расстояния между центральным ионом и местом образования гидратной оболочки.

«В данном исследовании, в качестве попытки предотвратить получение неправильных данных, разрабатывается новая модель гидратной оболочки иона, основанная на его топологических, электростатических и гидрофильных свойствах», – сообщил автор исследования доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории сорбционных методов ГЕОХИ РАН Анатолий Долгоносов.

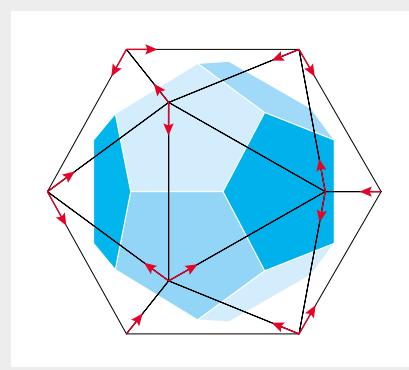


Рис. 1. Геометрическая модель первого гидратного слоя иона: правильный икосаэдр – для водоподобных ионов типа W, вписанный в него правильный додекаэдр – для металлоподобных ионов типа M. В вершинах расположены атомы кислорода. Концы стрелок обозначают вариант расположения атомов водорода

* Долгоносов А. М. Водородное связывание и локальные электростатические взаимодействия в неэмпирической аналитической модели гидратной оболочки ионов. Сорбционные и хроматографические процессы. 2025;25 (1): 5–16, <https://doi.org/10.17308/sorpcrom.2025.25/12788>

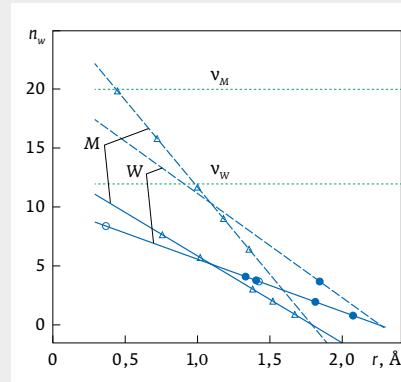


Рис. 2. Теоретические зависимости гидратных чисел от ионных радиусов однозарядных (сплошные линии) и двухзарядных (штриховые линии) ионов двух типов: W – водоподобных; M – металлоподобных. Пустыми значками обозначены изученные в работе катионы, закрашенными – анионы

В недавних работах автора аналитически получено важное и полезное неэмпирическое выражение для зависимости диэлектрической проницаемости от расстояния. Кроме того, энергия гидратации описывается с учетом не только локальной диэлектрической проницаемости, но и типа взаимодействия между ионами и молекулами воды и формы многослойной гидратной оболочки. Предложено геометрическое представление первого гидратного слоя сферического иона в виде Платоновых тел. Так, икосаэдр относится к «структурообразующим» ионам, иначе называемым «водоподобными», а додекаэдр – к «структуроразрушающим», или «металлоподобным» ионам (рис. 1). Показано, как число гидратации иона зависит от ионного радиуса, заряда и способности иона к образованию водородных связей. Проведены расчеты, относящиеся к рядам катионов и анионов (рис. 2).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России.

Пресс-служба ГЕОХИ им. В. И. Вернадского РАН

КАК ПРОДЛИТЬ СРОК СЛУЖБЫ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И УВЕЛИЧИТЬ МОЩНОСТЬ УСТРОЙСТВ?

Международный коллектив ученых из Института общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», Центра водных исследований Нью-Йоркского университета в Абу-Даби, Института физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН разработал новый тип мембран для топливных элементов, которые могут стать ключом к более эффективной и экологичной энергетике будущего. Результаты работы опубликованы в *International Journal of Hydrogen Energy* [°].

В борьбе за экологически чистую энергию водородные топливные элементы занимают особое место. Эти устройства, преобразующие химическую энергию в электрическую, практически не производят вредных выбросов – только воду и тепло. Но чтобы эта технология стала по-настоящему массовой, ученым нужно решить одну важную проблему: создать долговечные и эффективные материалы для ключевого компонента топливных элементов – протонпроводящих

мембран. Сейчас используются мембранны на основе перфосульфополимеров. Обычные мембранны на их основе хорошо работают при высокой влажности, но теряют эффективность, когда водород и воздух становятся сухими. Кроме того, они расширяются и сжимаются при изменении влажности, что со временем приводит к их разрушению.

Группа ученых из Москвы и Абу-Даби нашла оригинальное решение этой проблемы. Они создали гибридный материал на основе полимера Aquivion с высоким содержанием сульфогрупп, добавив в него неорганические компоненты – наночастицы кремнезема и кислую цезиевую соль фосфорновольфрамовой кислоты. Как объяснила доктор химических наук Екатерина Сафонова из ИОНХ РАН, эти добавки выполняют сразу две важные функции: во-первых, они стабилизируют структуру мембранны, ограничивая

изменение размеров материала при изменении влажности, а во-вторых, улучшают протонную проводимость при небольшой влажности.

«Результаты впечатляют: топливные элементы с новыми мембранны демонстрируют в 1,5 раза большую мощность по сравнению с традиционными аналогами при низкой влажности и при этом гораздо стабильнее механически. Это важный шаг к созданию более надежных и эффективных энергетических систем будущего», – рассказала Екатерина. Авторы планируют работать над дальнейшим улучшением эксплуатационных характеристик аналогичных мембранны, в частности, повышением химической устойчивости при работе в топливном элементе.

Это открытие, поддержанное Российским научным фондом (№ 21-73-10149), может значительно продлить срок службы топливных элементов и увеличить мощность устройств, сделав водородную энергетику более доступной. В перспективе такие технологии помогут сократить зависимость от ископаемого топлива и снизить вредное воздействие на окружающую среду.

Пресс-служба ИОНХ им. Н. С. Курнакова РАН

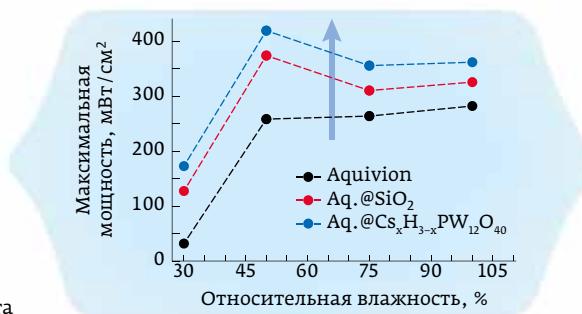
Сафонова Е., Стреттон Н., Корчагин О., Голубенко Д.,
Хил Н., Ярославцев А. Hybrid Aquivion[®]
membranes doped by SiO_2 and $\text{Cs}_x\text{H}_{3-x}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$
with improved dimensional stability for proton
exchange membrane fuel cells. *International Journal
of Hydrogen Energy*. 2025; 145: 1120–1133.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.06.144>.

Повышенная мощность H_2 / воздух топливного элемента на основе композитов Aquivion(EW = 790)@ SiO_2 и @ $\text{Cs}_x\text{H}_{3-x}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$

Сохраняется высокая
проводимость
при низкой влажности



Наночастица донанта



Предотвращается чрезмерное
набухание при высокой
влажности



Допирование мембранны неорганическими частицами позволяет повысить мощность топливного элемента, в том числе при низкой влажности, а также повышает стабильность ее размеров при гидратации/дегидратации (автор схемы – Даниил Голубенко)

19–21 НОЯБРЯ 2025
КРАСНОЯРСК, МВДЦ «СИБИРЬ»

СИБИРСКИЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ФОРУМ



СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫЕ ВЫСТАВКИ

ЭЛЕКТРОТЕХНИКА
ЭНЕРГЕТИКА
АВТОМАТИЗАЦИЯ
СВЕТОТЕХНИКА

НЕФТЬ. ГАЗ. ХИМИЯ

МЕТАЛЛООБРАБОТКА
И СВАРКА

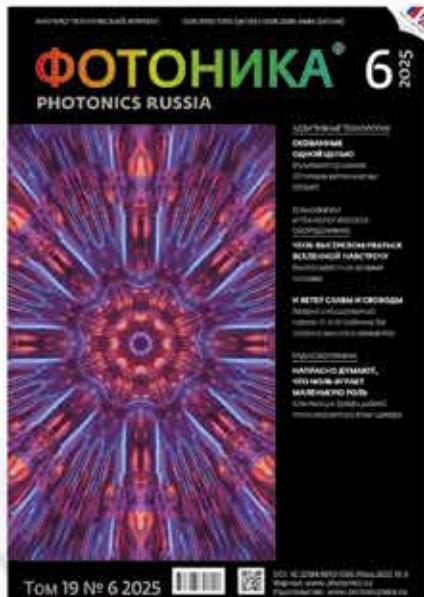


ТЕХНОСФЕРА
РЕКЛАМНО-ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР

**100% ГАРАНТИЯ
ПОЛУЧЕНИЯ ВСЕХ НОМЕРОВ**



Стоимость 2200 р. за номер
Периодичность: 10 номеров в год
www.electronics.ru



Стоимость 1450 р. за номер
Периодичность: 8 номеров в год
www.photonics.su



Стоимость 1450 р. за номер
Периодичность: 6 номеров в год
www.j-analytics.ru

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛЫ

www.technosphera.ru



Стоимость 1300 р. за номер
Периодичность: 8 номеров в год
www.lastmile.su



Стоимость 1300 р. за номер
Периодичность: 8 номеров в год
www.nanoindustry.su



Стоимость 1800 р. за номер
Периодичность: 4 номера в год
www.stankoinstrument.su