

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АММИАКА С АТОМАМИ ВОДОРОДА, КИСЛОРОДА И ГИДРОКСИЛЬНЫМ РАДИКАЛОМ

А.А. АРУТЮНЯН, С.Д. АРСЕНТЬЕВ*, А.Г. ДАВТЯН

Институт химической физики им. А.Б. Налбандяна НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: arsentiev53@mail.ru

(Поступила в редакцию 14 мая 2025 г.)

Вычислительными методами квантовой химии исследованы энергетические пути возможных реакций аммиака с атомами водорода и кислорода, а также гидроксильным радикалом. Методами B3LYP, M062X, MP2 и CBS-QB3 локализованы стационарные точки на поверхности потенциальной энергии системы, содержащей указанные реагенты. Выявлен ряд промежуточных соединений, образующихся при взаимодействии аммиака с атомами и радикалами, получена информация о структуре и термохимических параметрах образующихся интермедиатов. По результатам расчетов построены диаграммы энергетических уровней рассматриваемых систем. Полученные результаты показывают важную роль реакций NH_3+H , NH_3+O и NH_3+OH в процессах горения аммиака.

1. Введение

В условиях ускоряющегося изменения климата и острой необходимости сокращения глобальных выбросов углерода поиск альтернативных источников энергии становится все более актуальным. С этой точки зрения перспективным представляется использование аммиака, который широко используется в промышленности, в частности в качестве удобрения [1]. В то же время потенциал аммиака как безуглеродного топлива все больше привлекает внимание исследователей [2]. Его способность храниться в жидкой и твердой формах [3, 4] при относительно низких давлениях и температурах окружающей среды обеспечивает существенное преимущество по сравнению с другими видами топлива на основе водорода, которые часто требуют более сложной и дорогой инфраструктуры [5].

Исследования показали, что аммиак может использоваться непосредственно в двигателях внутреннего сгорания, газовых турбинах и даже топливных элементах, которые могут служить заменой традиционного топлива в различных секторах [6]. Кроме того, потенциальная роль аммиака в хранении энергии, особенно в системах возобновляемой энергии, привлекла интерес из-за его способности хранить энергию в течение длительного времени и использоваться при пиковом спросе [7].

Несмотря на имеющиеся достоинства, использование аммиака в качестве топлива не лишено ряда проблем, таких как его токсичность и коррозионная

активность. Также требуют решения [8] технические сложности, связанные с его получением, а также технологией сжигания. Одной из важнейших проблем является тот факт, что сжигание аммиака в качестве топлива может привести к выбросам оксидов азота NO_x [9–12], которые вредны для окружающей среды. Недавние исследования показали, что добавление водорода к аммиаку увеличивает окислительную активность последнего, создавая топливную смесь с нулевым выбросом углерода, а также улучшая интенсивность горения и снижая образование NO_x [13, 14]. В работах [14, 15] рассмотрены основные реакции, протекающие в процессе окисления аммиака.

В настоящей работе было проведено квантово-химическое исследование поверхностей потенциальной энергии систем, соответствующих взаимодействию аммиака с атомами водорода, кислорода и гидроксильными радикалами, с целью определения термохимических параметров продуктов, реагентов, переходных состояний и потенциальных короткоживущих промежуточных комплексных видов.

2. Методы расчета

Для определения термохимических параметров исследуемых реакций были использованы различные вычислительные квантово-химические методы, включающие как *ab initio* подходы, методы, основанные на теории функционала плотности (DFT), теории возмущений второго порядка Мёллера–Плессета [16, 17], а также метод полного базисного набора CBS-QB3 [18]. Кроме того, были использованы гибридные методы DFT, такие как B3LYP [19, 20] и гибридный функциональный метод более высокого уровня M06-2X, основанный на структуре meta-GGA (обобщенное градиентное приближение) [21, 22].

В расчетах использовались базисные наборы Попла, улучшенные поляризационными и диффузными функциями, в частности 6-311+G(2d,p) [23], а также расширенные корреляционно-согласованные базисные наборы Даннинга, aug-cc-pVTZ [24].

Первоначальные расчеты проводились с использованием метода B3LYP. Для проверки результатов и уточнения термохимических параметров реагентов, продуктов и переходных состояний были проведены дополнительные расчеты с использованием методов MP2, CBS-QB3 и M06-2X. Окончательные результаты, представленные в этом исследовании, были получены с использованием метода M06-2X/aug-cc-pVTZ, который обеспечивает благоприятный баланс вычислительной эффективности и точности.

Все квантово-химические расчеты проводились с использованием программного пакета Gaussian 16 [25]. Анализ и визуализация молекулярных структур и результатов вычислений были выполнены с помощью GaussView 6.1 [26].

Чтобы установить связь между переходным состоянием и соответствующими реагентами и продуктами, были выполнены дополнительные расчеты с использованием процедуры внутренней координаты реакции (IRC), реализованной в программном обеспечении Gaussian 16.

3. Результаты и обсуждение

В этом исследовании были изучены три основных реакции аммиака.

Реакция с атомом водорода, приводящая к образованию аминорадикала (NH_2) и молекулярного водорода, а также образованию аммония (NH_4):



Реакция с атомом кислорода, который может отрывать атом водорода с образованием NH_2 и гидроксильного радикала. Альтернативно, атом кислорода может присоединиться к молекуле аммиака с образованием радикального аддукта (ONH_3), который впоследствии может изомеризоваться в более стабильный гидроксилламин (NH_2OH):



Реакция с гидроксильным радикалом, где межмолекулярный перенос атома водорода происходит по следующим путям:



В тексте, таблицах и рисунках стационарные точки, соответствующие переходным состояниям (TS) реакций (1)–(3), обозначены как TS1–TS3, соответственно. Переходное состояние для реакции (4a) обозначено как TS4a, а для реакции (5) как TS5.

Если не указано иное, все обсуждаемые числовые данные были получены с использованием метода M06-2X/aug-cc-pVTZ.

3.1. Взаимодействие атома водорода с аммиаком

На рис.1 приведена диаграмма полной энергии системы, отражающей взаимодействие аммиака с атомом водорода. Можно видеть, что для реакций (1) и (2) были локализованы переходные состояния TS1 и TS2.

Термохимические параметры реагентов и интермедиатов для данной системы приведены в табл.1.

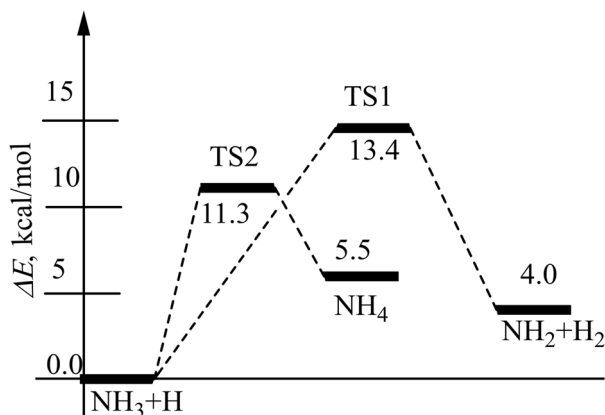


Рис.1. Диаграмма полной энергии для системы $\text{NH}_3 + \text{H}$, рассчитанная с использованием метода M062X/Aug-CC-pVTZ.

Табл.1. Значения энтальпии (ΔH , ккал/моль) локализованных стационарных точек относительно NH_3+H , рассчитанные с использованием методов M062X, CBS-QB3 и MP2

Система	ΔH , ккал/моль				
	M062X ¹⁾	MP2(full) ¹⁾	M062X ²⁾	MP2(full) ²⁾	CBS-QB3
NH_3+H	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
NH_2+H_2	3.8	8.7	4.0	9.3	2.3
NH_4	10.2	12.6	5.0	4.6	0.2
TS1	12.9	20.7	12.8	19.7	12.6
TS2	13.7	17.5	10.7	12.1	6.7

Примечание: 1) базовый набор – 6-311 + G(2d,p),

2) базовый набор – aug-cc-pVTZ

Анализ энергетических барьеров на рис.1 и данных табл.1 показывает, что в системе NH_3+H наиболее энергетически выгодным является исходное состояние, а система NH_4 более стабильна, чем NH_2+H_2 .

Значения энтальпии приведены в табл.1, причем суммарная энтальпия реагентов NH_3+H принята за ноль, а остальные значения даны относительно последней. Метод MP2 дает более высокие значения энтальпии по сравнению с методами M06-2X и CBS-QB3, особенно для переходных состояний (см. табл.1). Рассчитанные значения энтальпии для продуктов NH_2+H_2 и NH_4 показывают, что реакция $\text{NH}_3+\text{H} \rightarrow \text{NH}_4$ имеет энергию активации приблизительно 11.3 ккал/моль, тогда как реакция $\text{NH}_3+\text{H} \rightarrow \text{NH}_2+\text{H}_2$ требует более высокой энергии активации 13.4 ккал/моль. Это говорит о том, что образование NH_2+H_2 из NH_3+H более энергетически затратно, требуя большего подвода энергии для преодоления барьеров переходного состояния. Как видно из рис.1 и табл.1, реакция присоединения водорода требует меньшей энергии активации по сравнению с отрывом водорода ($\Delta E = 2.1$ ккал/моль). Однако экзотермичность реакции (2) выше на 1.5 ккал/моль.

3.2. Взаимодействие атома кислорода с аммиаком

Реакция аммиака с атомом кислорода, в частности образование аминогруппы NH_2 и гидроксильного радикала (реакция (3)), является одним из критических аспектов горения аммиака.

Для системы NH_3+O было обнаружено переходное состояние TS3, а энергетическая диаграмма реакции $\text{NH}_3+\text{O} \rightarrow \text{NH}_2+\text{OH}$ показана на рис.2.

Термохимические параметры реагентов и интермедиатов для системы NH_3+O , полученные разными методами, приведены в табл.2.

Представленные в табл.2 значения энтальпий для системы NH_3+O показывают, что метод MP2, как и для системы NH_3+H , переоценивает значения энтальпии. Суммарная энтальпия NH_2+OH имеет значения 5.2 ккал/моль (M062X) и 8.4 ккал/моль (MP2), что указывает на то, что этот продукт термодинамически

более стабилен по сравнению с реагентами.

Промежуточное соединение NH_3O является высокостабильным со значениями энтальпии -34.0 ккал/моль (M06-2X) и -31.2 ккал/моль (MP2), что указывает на то, что путь реакции, ведущий к этому промежуточному соединению, является благоприятным.

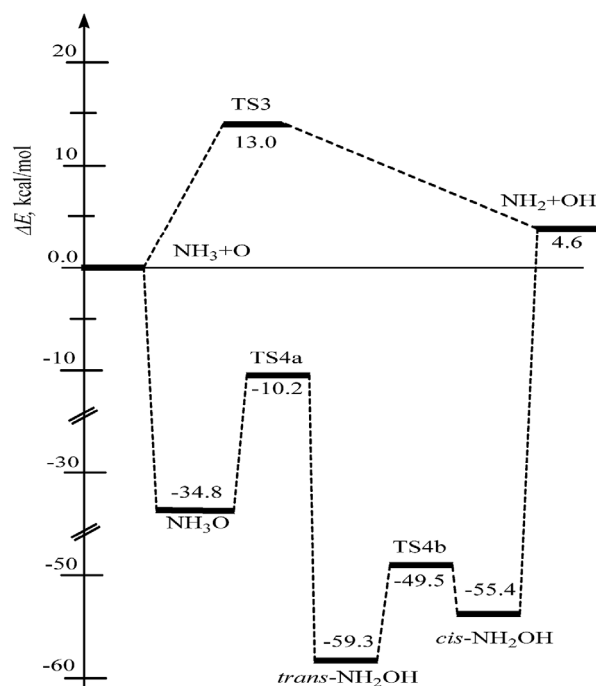


Рис.2. Диаграмма полной энергии для системы NH_3+O , рассчитанная с использованием метода M062X/Aug-CC-pVTZ.

Табл.2. Значения энтальпии (ΔH , ккал/моль) локализованных стационарных точек относительно NH_3+O , рассчитанные с использованием методов M062X, CBS-QB3 и MP2

Система	ΔH , ккал/моль				
	M062X ¹⁾	MP2(full) ¹⁾	M062X ²⁾	MP2(full) ²⁾	CBS-QB3
NH_3+O	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
NH_2+OH	5.2	8.4	4.6	7.1	4.9
NH_3O	-34.0	-31.2	-35.4	-36.7	-35.6
<i>trans</i> - NH_2OH	-59.3	-57.0	-59.9	-61.9	-60.1
<i>cis</i> - NH_2OH	-54.9	-52.3	-56.0	-57.8	-55.8
TS3	7.6	15.1	12.4	13.6	8.4
TS4a	-9.3	-7.3	-10.8	-12.8	-11.1
TS4b	-49.0	-45.6	-50.1	-50.9	-49.2

Примечание: 1) базовый набор – 6-311 + G(2d,p),

2) базовый набор – aug-cc-pVTZ

3.3. Взаимодействие гидроксильного радикала с аммиаком

Взаимодействие между аммиаком и гидроксильными радикалами (OH) играет важную роль в управлении процессами горения и смягчении образования загрязняющих веществ. Ключевым каналом является образование аминорадикала и воды по реакции (5). Анализ этой реакции особенно важен для понимания механизма окисления аммиака в контролируемых условиях горения. Диаграмма полной энергии для этой системы приведена на рис.3.

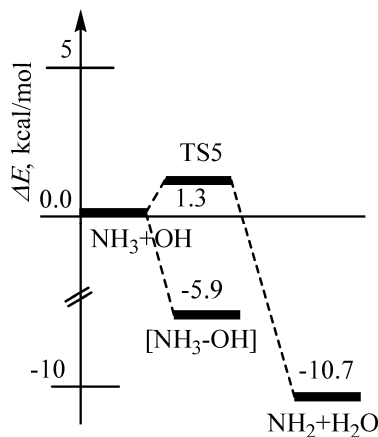


Рис.3. Диаграмма полной энергии для системы $\text{NH}_3 + \text{OH}$, рассчитанная с использованием метода M062X/Aug-CC-pVTZ.

В табл.3 приведены термохимические параметры реагентов и интермедиатов для системы $\text{NH}_3 + \text{OH}$, полученные разными методами.

Табл.3. Значения энтальпии (ΔH , ккал/моль) локализованных стационарных точек относительно $\text{NH}_3 + \text{OH}$, рассчитанные с использованием методов M062X, CBS-QB3 и MP2

Система	ΔH , ккал/моль				
	M062X1)	MP2(full) 1)	M062X2)	MP2(full) 2)	CBS-QB3
$\text{NH}_3 + \text{OH}$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$\text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	-10.0	-12.0	-10.7	-13.0	-11.5
$[\text{NH}_3\text{-OH}]$	-7.1	-6.5	-6.5	-6.3	-6.2
TS4	0.9	7.0	0.7	5.6	1.4

Примечание: 1) базовый набор – 6-311 + G(2d,p),
2) базовый набор – aug-cc-pVTZ

Представленные в табл.3 значения энтальпии исходных реагентов ($\text{NH}_3 + \text{OH}$) приняты за ноль, а все остальные значения указаны относительно этой точки отсчёта. Как и в предыдущих системах, метод MP2 имеет тенденцию переоценивать значения энтальпии. Продукт реакции $\text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O}$ имеет значение энтальпии

–10.0 ккал/моль, что указывает на термодинамическую благоприятность реакции.

На рис.4 представлены структуры локализованных переходных состояний, а основные термохимические параметры переходных состояний приведены в табл.1–3.

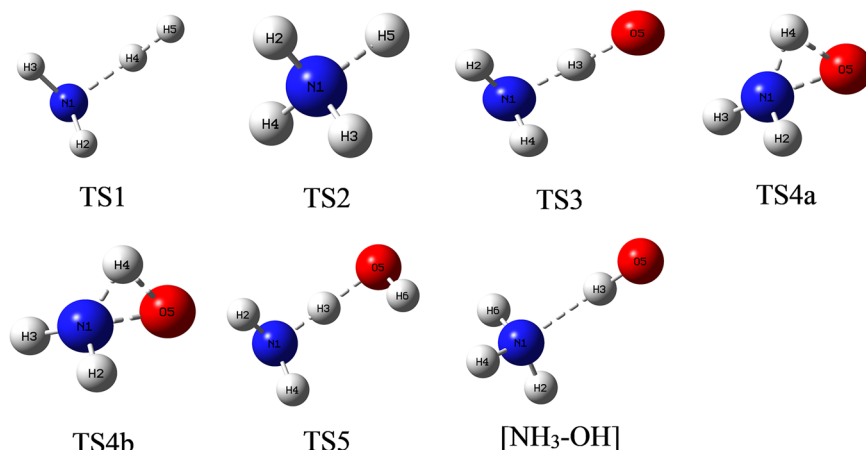


Рис.4. Оптимизированные структуры переходных состояний для реакций (1)–(5) и комплекса $[\text{NH}_3\text{--OH}]$, полученные с использованием метода M06-2X/aug-cc-pVTZ.

Также было исследовано переходное состояние реакции (6). В ходе поиска этого переходного состояния был идентифицирован комплекс $[\text{NH}_3\text{--OH}]$ (рис.4).

Энергия активации (E_a) для реакции $\text{NH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}_2$, как видно из табл.4, относительно низкая, что подтверждает вероятность более эффективного

Табл.4. Значения энергии активации (E_a , ккал/моль) для всех изученных реакций, рассчитанные с использованием методов M06-2X, CBS-QB3 и MP2

Реакция	ΔE_a , ккал/моль				
	M062X ¹⁾	MP2 ¹⁾	M062X ²⁾	MP2 ²⁾	CBS-QB3
$\text{NH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}_2$	13.5	21.3	13.4	20.3	13.2
$\text{NH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{NH}_4$	14.3	18.1	11.3	12.7	7.3
$\text{NH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{OH}$	8.2	15.7	13.0	14.2	9.0
$\text{NH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{NH}_3\text{O}$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$\text{NH}_3\text{O} \rightarrow \text{trans-NH}_2\text{OH}$	24.8	23.9	24.6	23.8	24.5
$\text{trans-NH}_2\text{OH} \rightarrow \text{cis-NH}_2\text{OH}$	10.4	11.5	10.0	11.0	10.9
$\text{cis-NH}_2\text{OH} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{OH}$	59.6	60.0	60.0	64.3	60.12
$\text{NH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	1.5	7.6	1.3	6.2	2.0
$\text{NH}_3 + \text{OH} \rightarrow [\text{NH}_4\text{--O}]$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Примечание: 1) базовый набор – 6-311 + G(2d,p),

2) базовый набор – aug-cc-pVTZ

протекания реакции при более низких температурах, что является более благоприятным путем в сжигании аммиака. Присутствие водорода, по-видимому, снижает барьер активации, что может привести к повышению эффективности сгорания. Энергии активации, рассчитанные с использованием метода M06-2X для реакции $\text{NH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{OH}$, имеют энергетический барьер около 13.0 ккал/моль и 9.0 ккал/моль с использованием метода CBS-QB3. Это говорит о том, что реакция осуществима в условиях горения, хотя энергия активации выше, чем у реакции в системе аммиак–водород. Присутствие кислорода в реакции говорит о том, что процесс окисления может быть более сложным, требуя более высоких температур для инициирования реакции.

Образование гидроксильных радикалов OH играет важную роль в развитии процесса горения аммиака и, в конечном итоге, может приводить к образованию оксидов азота. Энергии активации для этой реакции варьируются от 1.3 ккал/моль (M062X) до 7.6 ккал/моль (MP2). Такая низкая энергия активации делает реакцию $\text{NH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O}$ одной из наиболее энергетически выгодных.

В реакциях (1), (3), (4b) и (5) образуется аминорадикальная группа NH_2 , которая представляет собой одновалентный радикал. Реакции аминорадикальной группы представляют особый интерес и могут служить предметом специальных исследований. В частности, одной из вероятных газозофазных реакций этой частицы является квадратичная рекомбинация $\text{NH}_2 + \text{NH}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{H}_4$.

Следует отметить, что вычислительное исследование обеспечивает всестороннее понимание энергетики и механизмов реакций NH_3 с H, O и OH, предоставляя ценную информацию для теоретических и экспериментальных исследований химии аммиака. В то же время необходимо учитывать, что процесс радикального присоединения к молекуле термодинамически менее выгоден с энтропийной точки зрения из-за потери внутренних степеней свободы. Поэтому для всестороннего анализа потребуется расчет соответствующих констант скорости.

4. Заключение

В результате проведенных исследований установлено, что взаимодействие атомов водорода с аммиаком представляет собой сумму эндотермических реакций, в то время как его реакции с гидроксильным радикалом протекают с выделением энергии. Отрыв атома водорода атомом кислорода от аммиака является эндотермической реакцией. Присоединение атома кислорода к аммиаку протекает с выделением энергии и через промежуточный радикал NH_3O приводит к образованию *cis*- и *trans*-изомеров NH_2OH .

Данные, полученные методами квантово-химических расчетов, позволяют глубже понять механизмы начальных стадий окисления аммиака, особенно в условиях высокотемпературного горения. Проведенный анализ энергетических барьеров и термодинамической стабильности промежуточных соединений даёт возможность предсказать наиболее вероятные пути реакций в зависимости от окружающих условий.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A. Valera-Medina, H. Xiao, M. Owen-Jones, W.I.F. David, P.J. Bowen.** *PECS*, **69**, 63 (2018).
2. **H. Kobayashi, A. Hayakawa, K.D.K.A. Somarathne, E.C. Okafor.** *Proc. Combust. Inst.*, **37**, 109 (2019).
3. **S. Giddey, S.P.S. Badwal, C. Munnings, M. Dolan.** *ACS Sustainable Chem. Eng.*, **5**, 10231 (2017).
4. **A. Afif, N. Radenahmad, Q. Cheok, S. Shams, J.H. Kim, A.K. Azad.** *Renew. Sustainable Energy Rev.*, **60**, 822 (2016).
5. **C. Zamfirescu, I. Dincer.** *J. Power Sources.*, **185**, 459 (2008).
6. **X. Deng, W. Zhao, L. Ye, S. Gong, F. Zhao, L. Jing.** *Int. J. Hydrogen Energy.*, **49**, 1232 (2024).
7. **D.R. MacFarlane, P.V. Cherepanov, J. Choi, B.H.R. Suryanto, R.Y. Hodgetts, J.M. Bakker, A.N. Simonov.** *Joule*, **4**, 1186 (2020).
8. **C. Smith, A. K. Hill, L. Torrente-Murciano.** *Energy Environ. Sci.*, **13**, 331 (2020).
9. **Y. Zhang, Y. Liang, W. Zhou, L. Yu, X. Lu.** *Combustion and Flame*, **259**, 113131 (2024).
10. **S. Gubbi, R. Cole, B. Emerson, D. Noble, R. Steele, W. Sun, T. Lieuwen.** *ACS Energy Lett.*, **8**, 4421 (2023).
11. **S. Oh, C. Park, M. Ahn, H. Jang, S. Kim.** *Fuel*, **332**, 126065 (2023).
12. **W. de Vries.** *Curr. Opin. Environ. Sci. Health.*, **21**, 100249 (2021).
13. **X. Zhang, P.M. Shamjad, R.P. Rajan, M. Younes, S.M. Sarathy.** *Combustion and Flame*, **234**, 111653 (2021).
14. **K.N. Osipova, X. Zhang, S.M. Sarathy, O.P. Korobeinichev, A.G. Shmakov.** *Fuel*, **310**, 122202 (2022).
15. **Y. Song, H. Hashemi, J.M. Christensen, C. Zou, P. Marshall, P. Glarborg.** *Fuel*, **181**, 358 (2016).
16. **C. Møller, M. S. Plesset.** *Phys. Rev.*, **46**, 618 (1934).
17. **M. Head-Gordon, J.A. Pople, M.J. Frisch.** *Chem. Phys. Lett.*, **153**, 503 (1988).
18. **J.A. Montgomery, M.J. Frisch, J.W. Ochterski, G.A. Petersson.** *J. Chem. Phys.*, **112**, 6532 (2000).
19. **T. Ziegler.** *Chem. Rev.*, **91**, 651 (1991).
20. **R.G. Parr.** *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **34**, 631 (1983).
21. **Y. Zhao, D.G. Truhlar.** *J. Chem. Phys.*, **125**, 194101 (2006).
22. **Y. Zhao, D.G. Truhlar.** *TCA*, **120**, 215 (2008).
23. **J. Zheng, X. Xu, D.G. Truhlar.** *TCA*, **128**, 295 (2011).
24. **A.H. Davtyan, Z.H. Manukyan, S.D. Arsentev, L.A. Tavadyan, V.S. Arutyunov.** *Russ. J. Phys. Chem. B*, **18**, 461 (2024).
25. **M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, et al.,** *Gaussian 16*, (Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2016).
26. **R. Dennington, T.A. Keith, J.M. Millam.** *GaussView, Version 6.1.* Semichem Inc., Shawnee Mission KS. (2019).

ԶՐԱԾԻՆ, ԹԹՎԱԾԻՆ ԱՏՈՄՆԵՐԻ ԵՎ ՀԻԴՐՈԳԵՆԻ, ՌԱԴԻԿԱԼԻ ՀԵՏ ԱՄՈՆԻԱԿԻ
ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼ ԷՆԵՐԳԻԱՅԻ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԻ
ՔՎԱՆՏԱՔԻՄԻԱԿԱՆ ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒՄԸ

Հ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ս.Դ. ԱՐՍԵՆՏԵՎ, Ա.Հ. ԴԱՎԹՅԱՆ

Քվանտային քիմիայի հաշվարկային մեթոդներով ուսումնասիրվել են ամոնիակի հնարավոր ռեակցիաների էներգետիկ ուղիները՝ ջրածնի և թթվածնի ատոմների, ինչպես նաև հիդրոքսիլ ռադիկալի հետ: B3LYP, M062X, MP2 և CBS-QB3 մեթոդները հայտնաբերել են նշված ռեակտիվները պարունակող համակարգի պոտենցիալ էներգիայի մակերևույթի վրա ստացիոնար կետեր: Հայտնաբերվել են մի շարք միջանկյալ միացություններ, որոնք առաջանում են ամոնիակի ատոմների և ռադիկալների հետ փոխազդեցության ժամանակ, և ստացվել են տեղեկություններ առաջացած միջանկյալ միացությունների կառուցվածքի և թերմոքիմիական պարամետրերի վերաբերյալ: Հաշվարկների արդյունքների հիման վրա կառուցվել են ուսումնասիրվող համակարգերի էներգետիկ մակարդակների դիագրամներ: Ստացված արդյունքները ցույց են տալիս NH_3+H , NH_3+O և NH_3+OH ռեակցիաների կարևոր դերը ամոնիակի այրման գործընթացներում:

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF THE SURFACE OF POTENTIAL ENERGY
OF INTERACTION OF AMMONIA WITH ATOMS HYDROGEN,
OXYGEN AND HYDROXYL RADICAL

H.A. HARUTYUNYAN, S.D. ARSENTEV, A.H. DAVTYAN

Computational methods of quantum chemistry were used to study the energy pathways of possible reactions of ammonia with hydrogen and oxygen atoms, as well as with the hydroxyl radical. The B3LYP, M062X, MP2 and CBS-QB3 methods were used to localize stationary points on the potential energy surface of the system containing the above reagents. A number of intermediate compounds formed during the interaction of ammonia with atoms and radicals were identified, and information on the structure and thermochemical parameters of the intermediates formed was obtained. Based on the calculation results, diagrams of the energy levels of the systems under consideration were constructed. The results obtained demonstrate the important role of the NH_3+H , NH_3+O and NH_3+OH reactions in the processes of ammonia combustion.