



Рисунок - Температурная зависимость вязкостных свойств водных растворов аprotонных растворителей

Полученные результаты можно объяснить существенным структурированием этих систем в результате возрастания среднестатистического действующего объема гидратов и значительным уменьшением степени гидратации молекул аprotонных растворителей с увеличением температуры в результате интенсификации теплового движения частиц.

УДК 536:665.666.24

КОНФОРМАЦИОННОЕ СОСТОЯНИЕ КАТИОНА 1-БУТИЛ-3-МЕТИЛИМИДАЗОЛИЯ

В.Н. Емельяненко, Г.Н. Роганов

Могилевский государственный университет продовольствия, Беларусь

Ионные жидкости (ИЖ) - неводные органические соли, состоящие из большого по размерам асимметричного органического катиона и неорганического аниона и обладающие уникальными свойствами – большой избирательностью в процессах экстракции и катализа, высокой электропроводностью, широкой температурной областью существования жидкого состояния и термической стабильности, малой летучестью. Значительным преимуществом ИЖ является их большая экологическая безопасность.

Методом RHF/3-21G* изучено конформационное состояние катиона 1-бутил-3-метилимидазолия в газовой фазе при 298.15 К. Найдены структуры и относительные энергии всех конформаций катиона, начиная с компланарной, получающихся при последовательном повороте алкильных групп вокруг связей N-C и C-C бутильного радикала (двугранные углы CCCN и CCNC) на 360° с шагом 10°. Установлено, что катион представлен семью устойчивыми конформациями (conf1, 2 и 3), причем шесть из них являются попарно зеркально-изомерными и энергетически равноценными друг другу (см. табл.). Методами RHF и RB3LYP в базисе 6-31G(d) рассчитаны энергии и совокупности фундаментальных частот конформеров, определена их относительная энергетическая стабильность.

Методами RHF и RB3LYP выполнена оптимизация геометрии и определены абсолютные энергии аниона PF₆⁻. Найдены величины милликеновских плотностей зарядов по атомам, входящим в состав катиона и рассчитана энергия ИЖ.

Геометрические параметры и относительные энергии конформеров катиона 1-бутил-3-метилимидазолия

Конформер	Угол CCCN, °	Угол CCNC, °	RHF/6-31G(d) E ₀ , Hartree	RHF/6-31G(d) TCH, Hartree	Относительные энергии, 298.15 К, кДж/моль
conf1	180.0	±103.0	-420.384736	0.254389	0.00
conf2	±65.0	±109.0	-420.38430	0.254391	1.15
conf3	±65.0	±82.0	-420.383450	0.254369	3.30
conf4	180.0	0.00	-420.383386	0.254601	4.10

УДК 536:661.726

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТОКСИАЦЕТИЛЕНА ПО МОЛЕКУЛЯРНЫМ И СПЕКТРАЛЬНЫМ ДАННЫМ

П.Н. Писарев, Э.С. Волкова, Г.Н. Роганов

Могилевский государственный университет продовольствия, Беларусь

Молекулярные и спектральные характеристики, необходимые для расчета термодинамических функций метоксиацетилена методами статистической термодинамики хорошо изучены и описаны в литературе.

Геометрические параметры, вращательные постоянные и дипольные моменты молекул метоксиацетилена и 2-дейтеро-1-метоксиэтина определены из микроволновых абсорбционных спектров. Произведение момен-