

УДК 544.353.2

МОДЕЛЬ ДЛЯ РАССЧЕТА МЕХАНИЗМОВ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ

Хворост Т.А. (Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский университет ИТМО"),
Чернышов И.Ю. (Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский университет ИТМО")
Научный руководитель – PhD по химии, профессор-исследователь Пидько Е.А.
(Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский университет ИТМО")

В данной работе была предложена и протестирована теоретическая модель для учета сольватационных эффектов в химических реакциях. Модель позволяет рассчитать влияние сольватации как на кинетику реакции, так и на ее механизм в широком диапазоне растворителей, включая ионные жидкости.

Введение. Ионные жидкости являются перспективными растворителями для использования в разных областях химии по причине наличия у них уникальных полезных свойств: экологическая чистота, пренебрежимо малое давление паров растворителя, способность к специфической сольватации ионов и т.д. Однако, не существует модели учета сольватационных эффектов в ионных жидкостях с учетом изменения геометрии химической системы, и, таким образом, не решена задача оптимизации геометрии химической системы в ионных жидкостях. Данная задача для других растворителей на данный момент является тривиальной и решается посредством так называемых непрерывных моделей сольватации, таких как CPCM, COSMO и COSMO-RS. Преимущество последней состоит в том, что она позволяет рассчитать энергетический эффект сольватации отдельной химической системы в ионных жидкостях, что и было использовано для «оптимизации» химических реакций в реальных растворах.

Основная часть. Чтобы «оптимизировать» геометрию химической системы в заданном растворителе необходимо исследование Поверхности Потенциальной Энергии (ППЭ) с заданными условиями, что на данный момент недоступно для модели COSMO-RS, но возможно для «обычных» квантовых расчётов. Такое исследование ППЭ вдоль внутренней координаты реакции называется расчётом IRC (internal reaction coordinate). Комбинация этих двух методов (COSMO-RS и IRC) и позволяет теоретически рассчитать влияние сольватационных эффектов на механизм химических реакций. В каждой точке расчета IRC будет рассчитана энергия сольватации с помощью модели COSMO-RS и прибавлена к электронной энергии, полученной из IRC. Полученный механизм реакции будет рассчитан с учетом энергетических эффектов, связанных с сольватацией, и сможет быть получен с учетом сольватации в ионных жидкостях.

Выводы. В данной работе была разработана теоретическая модель для расчета механизмов химических реакций в ионных жидкостях, которая позволит оптимизировать производственные химические процессы и предсказывать применимость тех или иных растворителей для химического синтеза. Так же данная модель является первым шагом к решению проблемы оптимизации геометрии химической системы в сложных растворах.

Хворост Т.А. (автор)

Подпись

Пидько Е.А. (научный руководитель)

Подпись

