

УДК 543.421

ВАРИАТИВНОСТЬ РОЛИ ВОДЫ В ГИДРАТООБРАЗОВАНИИ¹

Гринвальд И.И., Калагаев И.Ю., Спирин И.А., Грушевская А.И., Капустин Р.В.

*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
603950, г. Нижний Новгород, ул. Минина, д. 24*

Механизм гидратообразования представляет особый интерес ввиду того, что исключить влияние воды на процессы, протекающие в конденсированной, а в ряде случаев и в газовой фазе невозможно. С прикладной точки зрения этот вопрос интересен для ряда важных процессов, таких как получение веществ высокой чистоты, разделение газов с помощью полимерных мембран, получение биологически активных компонентов.

В настоящей работе представлен разработанный авторами общий подход и экспериментальные данные по исследованиям методом Фурье ИК-спектроскопии в сочетании с неэмпирическими расчетами в рамках теории функционала плотности *аква*-комплексов органических и неорганических систем в различных агрегатных состояниях: газообразных NH_3 и CO_2 , кристаллических NaOH , Na_2CO_3 и NaNO_3 , жидких CHCl_3 , CHBr_3 , CH_2Cl_2 , CH_2Br_2 , CH_2I_2 , CH_3NO_2 и CH_3CN , а также C_6H_6 , $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$, C_6F_6 , $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}$, $\text{C}_4\text{H}_4\text{S}$, ионных жидкостей (1-бутил-3-метилимидазолий хлорид) и (1-бутил-3-метилимидазолий тетрафторборат).

При регистрации спектров применялась техника матричной изоляции в твердых таблетках бромистого калия при комнатной температуре и низкотемпературных пленках в интервале температур 90-200 К.

Можно выделить четыре области, в которых наблюдаются изменения при взаимодействии с водой: 3600-3400, 3100-2900, 2600-2300 и 1400-1100 cm^{-1} . По поведению ИК-полос поглощения можно сделать достаточно точное заключение о роли воды в механизме комплексообразования, а также о степени переноса протона в гидрате. Изученные системы в некоторых случаях могут взаимодействовать с водой по нескольким конкурирующим механизмам. Квадратовхимические расчеты в рамках теории DFT подтверждают выводы, сделанные на основе спектральных измерений.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 15-08-05494-а, и Госзадания Минобрнауки России, проект № 2897