

УДК 544.169+544.142.4:544.361.3

ОСОБЕННОСТИ ВОДОРОДНОГО СВЯЗЫВАНИЯ В ПРОТОННЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ НА ОСНОВЕ ТРЕТИЧНОГО КАТИОНА¹Федорова И.В., Сафонова Л.П.

*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
153045, г. Иваново, ул. Академическая, д. 1
e-mail: fiv@isc-ras.ru*

Протонные ионные жидкости (ПИЖ) являются одним из подклассов ИЖ и менее изучены. Несмотря на их чистый ионный состав, Н-связи являются отличительной чертой ПИЖ и во многом обуславливают их физико-химические свойства. Объектами изучения явились ПИЖ на основе триэтил- (ТЕА) и триэтанол- (ТЕОА) амина и фосфористой кислоты. Посредством квантово-химического расчета методом B3LYP-GD3/6-31++G(d,p) показано, что оба амина, взаимодействуя с кислотой, способны образовывать только ионные пары $\text{АН} + \text{В} \rightarrow \text{А}^- \dots \text{ВН}^+$, в которых катион и анион прочно удерживаются между собой за счет электростатического взаимодействия и образования Н-связи. Установлено, что ионная пара ТЕОА/ H_2PO_3 является энергетически более стабильной, чем ионная пара с катионом ТЕА, что коррелирует с экспериментальными данными о термической стабильности этих ИЖ. Причиной этого служит наличие дополнительных Н-связей за счет ОН групп катиона ТЕОА и атомов кислорода дигидрофосфит аниона. Анализ характеристик критических точек водородной связи (AIM анализ) и энергий орбитальных взаимодействий (NBO метод) показал, что наиболее прочная N-H...O Н-связь наблюдается в ТЕА/ H_2PO_3 . Для ТЕОА/ H_2PO_3 связь N-H...O сильнее, чем связи O-H...O. Изучено влияние среды на стабильность ионных структур, полученных в газовой фазе в рамках континуальной модели С-PCM.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ и Ивановской области, научный проект № 18-43-370009