

***Квантовохимический расчет
структуры тетрафторбората
1 – алкил – 3 - метилимидазолия***

Автор: студентка 4 курса
Смирнова О. С.

Научный руководитель:
д. х. н. Павлов А. С.

ВВЕДЕНИЕ

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой новый класс низкотемпературных расплавов солей ($t_{пл} < 100^\circ\text{C}$), состоящих, как правило, из большого органического катиона и неорганического аниона. Благодаря своим уникальным свойствам, (высокой электрохимической и термической стабильности, низкому давлению паров, высокой электрической проводимости) ИЖ широко используются как растворители, экстрагенты, катализаторы и каталитические среды. Кроме того, ИЖ состоят практически из свободных носителей заряда, что делает особенно интересным их применение в индивидуальном виде и в виде смесей с апротонными диполярными растворителями в электрохимии в качестве электролитов для химических источников тока и суперконденсаторов.

Цель работы: проведение оптимизации геометрии, и расчет парциальных зарядов на атомах ряда 1 – алкил – 3 метилимидазолия тетрафторбората с использованием программного комплекса GAUSSIAN.

Актуальность работы: В настоящее время актуальным является исследование структурных особенностей строения ИЖ. Наиболее известными ИЖ являются ИЖ на основе катиона имидазолия.

Новизна: Использование квантохимических расчетов для предсказания геометрического строения, энергии, термодинамических характеристик и др. для известных и предполагаемых молекул является, в настоящее время, одним из важных и быстроразвивающихся методов химических исследований. Особую ценность этот метод приобретает в случае предсказания свойств неизвестных соединений, синтез которых может являться достаточно сложной процедурой, требующей больших затрат времени и материальных ресурсов исследователей. К тому же, на современном этапе развития компьютерной техники и создания высокопроизводительных и универсальных программ для квантовой химии, существует возможность расчета химических свойств соединений с очень высокой точностью и надежностью. Одной из таких программ по расчету структуры и свойств молекул является программа GAUSSIAN.

Задачи:

- Провести оптимизацию геометрии с помощью программного комплекса GAUSSIAN;
- Рассчитать парциальные заряды на атомах ряда 1 – алкил – 3 – метилимидазолия тетрафторбората;
- Найти наиболее устойчивую геометрию алкильного радикала