В.І. Булавін, М.В. Волобуєв, А.В. Крамаренко, Україна, Харків

РОЗРАХУНОК ЕНТАЛЬПІЇ СОЛЬВАТАЦІЇ ХЛОРИД- ТА БРОМІД-ІОНІВ У МЕТАНОЛІ МЕТОДАМИ КОМП'ЮТЕРНОЇ ХІМІЇ

Розраховано ентальпії утворення молекулярних та іон-молекулярних кластерів складу $(MeOH)_n$ та $(MeOH)_n \cdot Hal^-$ (n=1÷10) методи квантової механіки (B3LYP у базисі 6-31G**) та класичної молекулярної динаміки. Це дозволяє оцінити ентальпію процесу іонної сольватації.

В.И. Булавин, М.В. Волобуев, А.В. Крамаренко, Украина, Харьков

РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ СОЛЬВАТАЦИИ ХЛОРИД- И БРОМИД-ИОНОВ В МЕТАНОЛЕ МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ

Рассчитаны энтальпии образования молекулярных и ион-молекулярных кластеров состава $(MeOH)_n$ и $(MeOH)_n \cdot Hal^-$ (n=1÷10) методами квантовой механики (B3LYP, базис 6-31G**) и классической молекулярной динамики и оценен энтальпию процесса ионной сольватации.

V.I Bulavin, M.V. Volobuyev, A.V. Kramarenko, Ukraine, Kharkov

CALCULATION OF SOLVATION ENTHALPY FOR CHLORIDE- AND BROMIDE-IONS IN METHANOL USING COMPUTER CHEMISTRY METHODS

The formation entalpies for methanol clusters $(MeOH)_n$ and $(MeOH)_n \cdot Hal^-$ (n=1÷10) has been calculated using ab initio method (B3LYP in basis 6-31G**) and classical molecular dynamics. The results allow to estimate enthalpy contribution to ion solvation process.