

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОТЫ ГИДРАТАЦИИ ДИЭТИЛСУЛЬФОНА

А.С. Мхитарян, З.Х. Папанян, Л.С. Габриелян, Ш.А. Маркарян

Ашот Самвелович Мхитарян, Закар Хачикович Папанян, Лиана Сергеевна Габриелян \*,

Шираз Александрович Маркарян

Кафедра физической и коллоидной химии, Ереванский государственный университет, ул. Ал. Манукяна 1, 0025 Ереван, Армения

E-mail: mkhitaryan.ashot@ysu.am; z.papanyan@ysu.am; lgabriel@ysu.am\*; shmarkar@ysu.am

*Осуществлено квантово-химическое изучение процесса гидратации диэтилсульфона с использованием программного пакета Gaussian 09. Конформационный анализ изолированной молекулы диэтилсульфона выполнен ограниченным методом Хартри-Фока (RHF) и теорией функционала плотности (DFT/B3PW91) с применением расширенного базиса с учетом поляризационных и диффузионных функций 6-311++G(d,p). Анализ поверхности потенциальной энергии выявил существование четырех стабильных конформеров диэтилсульфона с разными степенями вырождения. Характер стационарных точек на поверхности потенциальной энергии подтвержден полной оптимизацией структуры в газовой фазе и колебательным анализом. Глобальный минимум фиксируется при значениях двух торсионных углов (CCSC), равных 180°. Исходя из распределения Больцмана проведена оценка относительной заселенности равновесных конформаций. Рассчитана средняя энергия молекулы диэтилсульфона в вакууме с учетом относительной заселенности равновесных конформаций. Модель самосогласованного реактивного поля (SCRFP) и, в частности, модель растворителя на основе электронной плотности (SMD), применена для проведения расчетов с учетом растворителя. Показано, что растворитель имеет влияние на относительную заселенность равновесных конформаций. По данным квантово-химических расчетов определены термодинамические параметры конформеров диэтилсульфона, в частности энтальпии, как в газовой фазе, так и в водном растворе. Рассчитана средняя энергия молекулы диэтилсульфона в водной среде. Показано, что хотя процесс растворения кристаллического диэтилсульфона в воде имеет эндотермический характер, гидратация молекул диэтилсульфона, рассчитанная в газовой фазе, протекает с выделением теплоты. Рассчитанная теорией функционала плотности теплота растворения диэтилсульфона сопоставима с имеющимися в литературе экспериментальными данными.*

**Ключевые слова:** диэтилсульфон, квантово-химический расчет, модель самосогласованного реактивного поля, гидратация

## HEAT OF HYDRATION OF DIETHYLSULFONE BY QUANTUM CHEMICAL CALCULATION

A.S. Mkhitarian, Z.K. Papanyan, L.S. Gabrielyan, S.A. Markarian

Ashot S. Mkhitarian, Zakar K. Papanyan, Liana S. Gabrielyan \*, Shiraz A. Markarian

Department of Physical and Colloid Chemistry, Yerevan State University, Alex Manukyan st., 1, Yerevan, 0025, Armenia

E-mail: mkhitarian.ashot@ysu.am; z.papanyan@ysu.am; lgabriel@ysu.am \*; shmarkar@ysu.am

*The quantum chemical study of the hydration of diethyl sulfone was performed by using Gaussian 09 software package. The conformational analysis of the isolated molecule of diethyl sulfone is performed by the restricted Hartree-Fock (RHF) and the density functional theory (DFT/B3PW91) methods with 6-311++G(d,p) extended basis set. The analysis of the potential energy surface revealed the existence of four stable conformers of diethyl sulfone with different degrees of degeneracy. The nature of stationary points on the potential energy surface is verified by the complete gas phase optimization and the vibrational analysis. The global minimum is the conformer with two (CCSC) dihedral angles equal 180°. The fractional population distribution of different conformers is determined by Boltzmann distribution. The average energy of the diethyl sulfone molecule in vacuum is calculated. To account the effect of solvent the self-consistent reaction field (SCRF) method, particularly, solvent model based on electron density (SMD), was employed. It is shown, that solvent affects on the relative population of conformers. The thermodynamic parameters, in particular enthalpy, for the conformers of diethyl sulfone are determined both in the gas phase and in the aqueous solution. The average energy of diethyl sulfone in water is calculated. It is shown, that although the dissolution of crystalline diethyl sulfone in water is an endothermic process, the hydration of diethyl sulfone molecules occurs with the release of heat. The heat of dissolution of diethyl sulfone calculated by the density functional theory is consistent with the experimental data.*

**Keywords:** diethyl sulfone, ab initio study, self-consistent reaction field, hydration

### Для цитирования:

Мхитарян А.С., Папаян З.К., Габриелян Л.С., Маркарян Ш.А. Квантово-химическое определение теплоты гидратации диэтилсульфона. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2018. Т. 61. Вып. 8. С. 17–21

### For citation:

Mkhitarian A.S., Papanyan Z.K., Gabrielyan L.S., Markarian S.A. Heat of hydration of diethylsulfone by quantum chemical calculation. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2018. V. 61. N 8. P. 17–21

## ВВЕДЕНИЕ

Растворы серосодержащих неэлектролитов, в частности сульфоксидов и сульфонов, благодаря уникальным физико-химическим свойствам, имеют широкое применение в различных областях науки, в частности в биомедицине и химической технологии [1-8]. Физико-химические характеристики сульфонов, в отличие от родственного им класса сульфоксидов [9-13], не так широко представлены в литературе. Ранее нами были изучены различные физико-химические свойства диметилсульфона (ДМСО<sub>2</sub>) и диэтилсульфона (ДЭСО<sub>2</sub>) и их растворов методами денсиметрии, поверхностного натяжения, калориметрии и диэлектрической релаксационной спектроскопии [14-17]. Теоретические исследования сульфонов в литературе ограничиваются лишь

первым представителем сульфонов – диметилсульфоном [1, 18] и без учета влияния растворителя. Цель данной работы – квантово-химическое моделирование гидратации диэтилсульфона с использованием модели самосогласованного реактивного поля, в частности, модели растворителя на основе электронной плотности (SMD).

## МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

Квантово-химические расчеты изолированной молекулы ДЭСО<sub>2</sub> в газовой фазе и в растворе выполнены с помощью программного пакета Gaussian 09 [19]. Поиск стационарных точек (включая локальные и глобальные минимумы, а также переходные состояния) на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) ДЭСО<sub>2</sub> проведен с использованием метода Хартри-Фока RHF/6-311++G(d,p) и теории функционала плотности

DFT/B3PW91/6-311++G(d,p). В работе [1] структурные параметры ДМСО<sub>2</sub>, рассчитанные методом DFT/B3PW91 с применением расширенного базиса, хорошо согласуются с экспериментальными данными. Учитывая адекватность результатов расчета для ДМСО<sub>2</sub>, данный метод был применен для расчета ДЭСО<sub>2</sub>. Модель самосогласованного реактивного поля (SCRf/SMD) применялась для определения теплоты гидратации диэтилсульфона.

#### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Оптимизированная структура и схема атомной нумерации молекулы ДЭСО<sub>2</sub>, а также зависимость потенциальной энергии ДЭСО<sub>2</sub> от торсионных углов D1(C14-C4-S1-C7) и D2(C10-C7-S1-C4), рассчитанная методом DFT/B3PW91/6-311++G(d,p), в трехмерном представлении приведены на рисунке. Характер стационарных точек на ППЭ был подтвержден полной оптимизацией структуры в газовой фазе и колебательным анализом. Анализ поверхности потенциальной энергии молекулы ДЭСО<sub>2</sub> в газовой фазе выявил наличие девяти стабильных конформеров, из которых идентичными являются четыре (исходя из симметрии): глобальный минимум при значениях торсионных углов D1 и D2 равных 180° и 180°, четырехкратно вырожденная структура – при 67° и 177° (идентичные ей структуры при -67°/177°, 177°/67° и 177°/-67°), двукратно вырожденные структуры – при 64° и 64° (идентичная ей структура при -64°/-64°), а также при 71° и -84° (идентичная ей структура при -84°/71°) (RHF/6-311++G(d,p)).

Для изучения процесса гидратации диэтилсульфона использовалась модель самосогласованного реактивного поля (SCRf), в частности, предложенный недавно метод SMD [20], позволяющий рассматривать среду неявно. Как известно, метод SMD включает поправки, связанные с кавитацией растворителя, дисперсией и возможными изменениями в структуре локального растворителя, и поэтому дает более точные энергии сольватации по сравнению с моделью поляризуемого континуума (PCM).

Относительная заселенность равновесных конформаций (P<sub>i</sub>) диэтилсульфона при 298 К, рассчитанная исходя из распределения Больцмана с учетом степени вырождения, а также их абсолютные и относительные энергии в газовой фазе и в водной среде приведены в таблице. Энергии гидратации при 0 К, а также энтальпии гидратации

при 298 К рассчитаны из разностей средних значений энергии и энтальпии молекулы ДЭСО<sub>2</sub> в растворе и в вакууме.

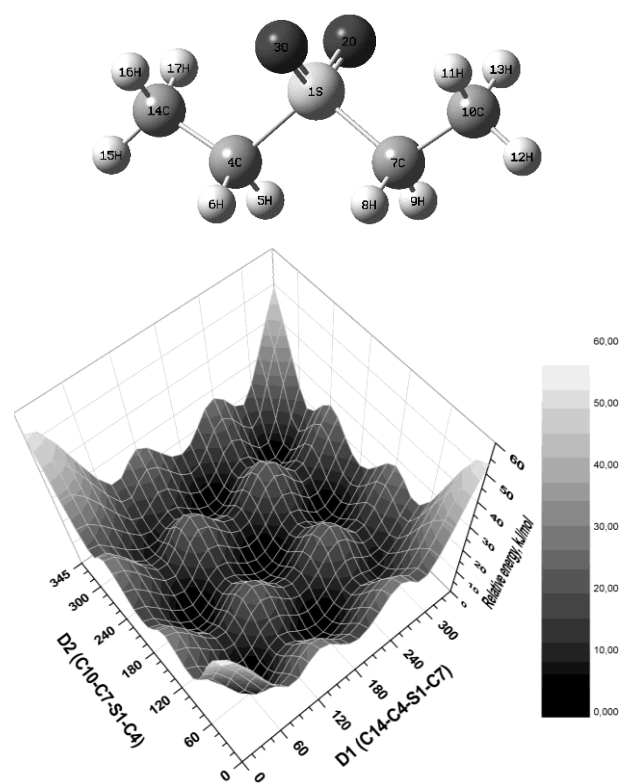


Рис. Зависимость потенциальной энергии молекулы ДЭСО<sub>2</sub> от торсионных углов D1(C10-C7-S1-C4) и D2(C14-C4-S1-C7), рассчитанная методом DFT/B3PW91/6-311++G(d,p)  
 Fig. The dependence of potential energy of diethyl sulfone on D1(C10-C7-S1-C4) and D2(C14-C4-S1-C7) dihedral angles according to the DFT/B3PW91/6-311++G(d,p) calculations

Согласно закону Гесса, тепловой эффект процесса при переходе кристаллической фазы в водный раствор можно рассматривать как сумму энтальпий сублимации и гидратации:  $\Delta H(\text{раств.}) = \Delta H(\text{субл.}) + \Delta H(\text{гидр.})$ .

Теоретически определенная энтальпия гидратации молекул ДЭСО<sub>2</sub> при 298 К методом RHF составляет -74,8 кДж/моль, а методом DFT/B3PW91: -60,0 кДж/моль. Учитывая, что энтальпия сублимации ДЭСО<sub>2</sub> равна 86,2 кДж/моль [21], рассчитанная энтальпия растворения составляет 11,4 кДж/моль (RHF) и 26,2 кДж/моль (DFT/B3PW91). Полученные данные указывают на эндотермический характер процесса растворения кристаллического ДЭСО<sub>2</sub>, и значение энтальпии растворения, рассчитанное с помощью теории функционала плотности, хорошо согласуется с экспериментально определенным значением энтальпии растворения ДЭСО<sub>2</sub>, которая равна 22 кДж/моль [15].

Рассчитанные торсионные углы D1 (C14-C4-S1-C7) и D2 (C10-C7-S1-C4), относительная заселенность равновесных конформаций (Pi) молекулы ДЭСО<sub>2</sub>, их абсолютные и относительные энергии в газовой фазе и в водной среде, энергия гидратации и энтальпия гидратации ДЭСО<sub>2</sub>

**Table.** The calculated dihedral angles D1 (C14-C4-S1-C7) and D2 (C10-C7-S1-C4), the relative population of conformers (Pi) of DESO<sub>2</sub>, their absolute and relative energies in the gas phase and water, energy and enthalpy of hydration of DESO<sub>2</sub>

Метод RHF/6-311++G(d,p)				Метод DFT/B3PW91/6-311++G(d,p)			
D1/D2	P <sub>i</sub>	E, Хартри	E <sub>отн</sub> , кДж/моль	D1/D2	P <sub>i</sub>	E, Хартри	E <sub>отн</sub> , кДж/моль
Газ				Газ			
64/64	0,159	-704,568289106	3,372	66/66	0,249	-706,987441295	1,082
180/180	0,311	-704,569573547	0	180/180	0,192	-706,987853562	0
67/177	0,520	-704,568751822	2,157	69/179	0,534	-706,987507635	0,908
71/-84	0,010	-704,565673507	10,240	78/-78	0,025	-706,985264698	6,797
Вода (SMD)				Вода (SMD)			
62/62	0,293	-704,596758975	-71,375	64/64	0,366	-707,010216810	-58,715
-178/178	0,174	-704,596924421	-71,810	-178/178	0,122	-707,009831545	-57,703
65/175	0,518	-704,596644181	-71,074	66/175	0,487	-707,009832098	-57,705
87/-64	0,015	-704,593943602	-63,984	86/-67	0,025	-707,007697985	-52,102
		ΔE <sup>OK</sup> <sub>гидр</sub> , кДж/моль	ΔH <sup>298K</sup> <sub>гидр</sub> , кДж/моль			ΔE <sup>OK</sup> <sub>гидр</sub> , кДж/моль	ΔH <sup>298K</sup> <sub>гидр</sub> , кДж/моль
		-72,95	-74,76			-58,85	-60,03

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного комитета по науке МОН РА в рамках научного проекта № 15Т-1D005.

## ЛИТЕРАТУРА

- Clark T., Murray J.S., Lane P., Politzer P. Why are dimethyl sulfoxide and dimethyl sulfone such good solvents? *J. Mol. Model.* 2008. V. 14. P. 689–697. DOI: 10.1007/s00894-008-0279-y.
- Vandermeeren L., Leyssens T., Peeters D. Theoretical study of the properties of sulfone and sulfoxide functional groups. *J. Mol. Struct. THEOCHEM.* 2007. V. 804. P. 1–8. DOI: 10.1016/j.theochem.2006.10.006.
- Jacob S.W., Lawrence R.M., Zucker M. The miracle of MSM, the natural solution for pain. New York: G.P. Putman's Sons. 1999. P. 57–58.
- Rose S.E., Chalk J.B., Galloway G.J., Doddrell D.M. Detection of dimethyl sulfone in the human brain by in vivo proton magnetic resonance spectroscopy. *Magn. Reson. Imaging.* 2000. V. 18. P. 95–98. DOI: 10.1016/S0730-725X(99)00110-1.
- Markarian S.A., Bonora S., Bagramyan K.A., Arakelyan V.B. Glass-forming property of the system diethyl sulphoxide/water and its cryoprotective action on *Escherichia coli* survival. *Cryobiology.* 2004. V. 49. P. 1–9. DOI: 10.1016/j.cryobiol.2004.04.001.
- Bonora S., Markarian S.A., Trincherо A., Grigorian K.R. DSC study on the effect of dimethylsulfoxide (DMSO) and diethylsulfoxide (DESO) on phospholipid liposomes. *Thermochim. Acta.* 2005. V. 433. P. 19–26. DOI: 10.1016/j.tca.2005.02.011.
- Abouimrane A., Belharouak I., Amine K. Sulfone-based electrolytes for high-voltage Li-ion batteries. *Electrochem. Commun.* 2009. V. 11. P. 1073–1076. DOI: 10.1016/j.elecom.2009.03.020.
- Wang Y., Xing L., Li W., Bedrov D. Why do sulfone-based electrolytes show stability at high voltages? Insight from density functional theory. *J. Phys. Chem. Lett.* 2013. V. 4. P. 3992–3999. DOI: 10.1021/jz401726p.
- Senent M.L., Dalbouha S., Cuisset A., Sadovskii D. Theoretical spectroscopic characterization at low temperatures of dimethyl sulfoxide: The role of anharmonicity. *J. Phys. Chem. A.* 2015. V. 119 N 37. P. 9644–9652. DOI: 10.1021/acs.jpca.5b06941.

## REFERENCES

- Clark T., Murray J.S., Lane P., Politzer P. Why are dimethyl sulfoxide and dimethyl sulfone such good solvents? *J. Mol. Model.* 2008. V. 14. P. 689–697. DOI: 10.1007/s00894-008-0279-y.
- Vandermeeren L., Leyssens T., Peeters D. Theoretical study of the properties of sulfone and sulfoxide functional groups. *J. Mol. Struct. THEOCHEM.* 2007. V. 804. P. 1–8. DOI: 10.1016/j.theochem.2006.10.006.
- Jacob S.W., Lawrence R.M., Zucker M. The miracle of MSM, the natural solution for pain. New York: G.P. Putman's Sons. 1999. P. 57–58.
- Rose S.E., Chalk J.B., Galloway G.J., Doddrell D.M. Detection of dimethyl sulfone in the human brain by in vivo proton magnetic resonance spectroscopy. *Magn. Reson. Imaging.* 2000. V. 18. P. 95–98. DOI: 10.1016/S0730-725X(99)00110-1.
- Markarian S.A., Bonora S., Bagramyan K.A., Arakelyan V.B. Glass-forming property of the system diethyl sulphoxide/water and its cryoprotective action on *Escherichia coli* survival. *Cryobiology.* 2004. V. 49. P. 1–9. DOI: 10.1016/j.cryobiol.2004.04.001.
- Bonora S., Markarian S.A., Trincherо A., Grigorian K.R. DSC study on the effect of dimethylsulfoxide (DMSO) and diethylsulfoxide (DESO) on phospholipid liposomes. *Thermochim. Acta.* 2005. V. 433. P. 19–26. DOI: 10.1016/j.tca.2005.02.011.
- Abouimrane A., Belharouak I., Amine K. Sulfone-based electrolytes for high-voltage Li-ion batteries. *Electrochem. Commun.* 2009. V. 11. P. 1073–1076. DOI: 10.1016/j.elecom.2009.03.020.
- Wang Y., Xing L., Li W., Bedrov D. Why do sulfone-based electrolytes show stability at high voltages? Insight from density functional theory. *J. Phys. Chem. Lett.* 2013. V. 4. P. 3992–3999. DOI: 10.1021/jz401726p.
- Senent M.L., Dalbouha S., Cuisset A., Sadovskii D. Theoretical spectroscopic characterization at low temperatures of dimethyl sulfoxide: The role of anharmonicity. *J. Phys. Chem. A.* 2015. V. 119 N 37. P. 9644–9652. DOI: 10.1021/acs.jpca.5b06941.

10. **Chaban V.** Force field development and simulations of senior dialkyl sulfoxides. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. V. 18. P. 10507-10515. DOI: 10.1039/c5cp08006a.
11. **Kirillov S.A., Gorobets M.I., Gafurov M.M., Ataev M.B., Rabadanov K.Sh.** Self-association and picosecond dynamics in liquid dimethyl sulfoxide. *J. Phys. Chem. B.* 2013. V. 117. P. 9439-9448. DOI: 10.1021/jp403858c.
12. **Wallace V.M., Dhumal N.R., Zehentbauer F.M., Kim H.J., Kiefer J.** Revisiting the aqueous solutions of dimethyl sulfoxide by spectroscopy in the mid- and near-infrared: Experiments and Car-Parrinello simulations. *J. Phys. Chem. B.* 2015. V. 119. P. 14780-14789. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b09196.
13. **Габриелян Л.С., Маркарян Ш.А.** Структурные и динамические свойства растворов диалкилсульфоксидов по данным диэлектрической релаксационной спектроскопии. *Журн. физ. химии.* 2018. Т. 92. № 2. С. 185-194. DOI: 10.7868/S0044453718020073.
14. **Gabrielyan L.S., Markarian S.A., Weingärtner H.** Dielectric spectroscopy of dimethylsulfone solutions in water and dimethylsulfoxide. *J. Mol. Liq.* 2014. V. 194. P. 37-40. DOI: 10.1016/j.molliq.2014.01.013.
15. **Маркарян Ш.А., Азнаурян М.Г., Казоян Е.А.** Физико-химические свойства водных растворов диметил- и диэтилсульфонов. *Журн. физ. химии.* 2011. Т. 85. № 12. С. 2138-2141. DOI: 10.1134/S0036024411120211.
16. **Ghazoyan H.H., Markarian S.A.** Densities and thermochemical properties of dimethylsulfone in dimethylsulfoxide and dimethylsulfoxide/water. *J. Mol. Liq.* 2013. V. 183. P. 85-88. DOI: 10.1016/j.molliq.2013.04.010.
17. **Казоян Е.А., Маркарян Ш.А.** Объемные свойства растворов диметилсульфона в смешанном растворителе (этанол-вода) в интервале температур 298,15-323,15 К. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2017. Т. 60. Вып. 7. С. 27-33. DOI: 10.6060/tcct.2017607.5564.
18. **Givan A., Grothe H., Loewenschuss A., Nielsen C.** Infrared spectra and ab initio calculations of matrix isolated dimethyl sulfone and its water complex. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2002. V. 4. P. 255-263. DOI: 10.1039/b107801c.
19. **Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H.P., Izmaylov A.F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J.L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J.A., Jr., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J.J., Brothers E., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam J.M., Klene M., Knox J.E., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Zakrzewski V.G., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Dapprich S., Daniels A.D., Farkas O., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J., Fox D.J.** Gaussian 09, Revision D.01. Gaussian, Inc., Wallingford CT. 2013.
20. **Marenich A.V., Cramer C.J., Truhlar D.G.** Universal solvation model based on solute electron density and a continuum model of the solvent defined by the bulk dielectric constant and atomic surface tensions. *J. Phys. Chem. B.* 2009. V. 113. P. 6378-6396. DOI: 10.1021/jp810292n.
21. **Chickos J.S., Acree W.E., Jr.** Enthalpies of vaporization of organic and organometallic compounds, 1880-2002. *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 2003. V. 32. P. 519-878. DOI: 10.1063/1.1529214.
10. **Chaban V.** Force field development and simulations of senior dialkyl sulfoxides. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. V. 18. P. 10507-10515. DOI: 10.1039/c5cp08006a.
11. **Kirillov S.A., Gorobets M.I., Gafurov M.M., Ataev M.B., Rabadanov K.Sh.** Self-association and picosecond dynamics in liquid dimethyl sulfoxide. *J. Phys. Chem. B.* 2013. V. 117. P. 9439-9448. DOI: 10.1021/jp403858c.
12. **Wallace V.M., Dhumal N.R., Zehentbauer F.M., Kim H.J., Kiefer J.** Revisiting the aqueous solutions of dimethyl sulfoxide by spectroscopy in the mid- and near-infrared: Experiments and Car-Parrinello simulations. *J. Phys. Chem. B.* 2015. V. 119. P. 14780-14789. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b09196.
13. **Gabrielyan L.S., Markarian S.A.** Dielectric relaxation spectroscopy study of the structure and dynamics of dialkyl sulfoxide solutions. *Russ. J. Phys. Chem. A.* 2018. V. 92. N 2. P. 205-213. DOI: 10.1134/S0036024418020073.
14. **Gabrielyan L.S., Markarian S.A., Weingärtner H.** Dielectric spectroscopy of dimethylsulfone solutions in water and dimethylsulfoxide. *J. Mol. Liq.* 2014. V. 194. P. 37-40. DOI: 10.1016/j.molliq.2014.01.013.
15. **Markaryan S.A., Aznauryan M.G., Kazoyan E.A.** Physicochemical properties of aqueous solutions of dimethyl- and diethylsulfones. *Zhurn.Fizich. Khim.* 2011. V. 85. N 12. P. 2138-2141. DOI: 10.1134/S0036024411120211 (in Russian).
16. **Ghazoyan H.H., Markarian S.A.** Densities and thermochemical properties of dimethylsulfone in dimethylsulfoxide and dimethylsulfoxide/water. *J. Mol. Liq.* 2013. V. 183. P. 85-88. DOI: 10.1016/j.molliq.2013.04.010.
17. **Kazoyan E.A., Markaryan Sh.A.** Volumetric properties of solutions of dimethylsulfone in ethanol-water mixture at temperatures range of 298,15-323,15 K. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Tekhnol.* 2017. V. 60. N 7. P. 27-33. DOI: 10.6060/tcct.2017607.5564 (in Russian).
18. **Givan A., Grothe H., Loewenschuss A., Nielsen C.** Infrared spectra and ab initio calculations of matrix isolated dimethyl sulfone and its water complex. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2002. V. 4. P. 255-263. DOI: 10.1039/b107801c.
19. **Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H.P., Izmaylov A.F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J.L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J.A., Jr., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J.J., Brothers E., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam J.M., Klene M., Knox J.E., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Zakrzewski V.G., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Dapprich S., Daniels A.D., Farkas O., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J., Fox D.J.** Gaussian 09, Revision D.01. Gaussian, Inc., Wallingford CT. 2013.
20. **Marenich A.V., Cramer C.J., Truhlar D.G.** Universal solvation model based on solute electron density and a continuum model of the solvent defined by the bulk dielectric constant and atomic surface tensions. *J. Phys. Chem. B.* 2009. V. 113. P. 6378-6396. DOI: 10.1021/jp810292n.
21. **Chickos J.S., Acree W.E., Jr.** Enthalpies of vaporization of organic and organometallic compounds, 1880-2002. *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 2003. V. 32. P. 519-878. DOI: 10.1063/1.1529214.

Поступила в редакцию (Received) 27.11.2017  
Принята к опубликованию (Accepted) 20.07.2018