

Для цитирования:

Сафонова Л.П., Федорова И.В., Крестьянинов М.А. Перенос протона в системе фосфорсодержащая кислота – N,N-диметилформамид при учете влияния среды. *Иzv. вузов. Химия и хим. технология.* 2016. Т. 59. Вып. 6. С. 37-43.

For citation:

Safonova L.P., Fedorova I.V., Krestyaninov M.A. Proton transfer in phosphorus-containing acid–N,N-dimethylformamide system with glance of environment. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2016. V. 59. N 6. P. 37-43.

УДК 544.15

Л.П. Сафонова, И.В. Федорова, М.А. Крестьянинов

Любовь Петровна Сафонова, Ирина Вадимовна Федорова (✉)

Лаборатория «Структура и динамика молекулярных и ион-молекулярных растворов», Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, ул. Академическая, 1, Иваново, Российская Федерация, 153045

E-mail: lps@isc-ras.ru, fiv@isc-ras.ru (✉)

Михаил Алексеевич Крестьянинов

Лаборатория «ЯМР-спектроскопия и численные методы исследования жидких систем», Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, ул. Академическая, 1, Иваново, Российская Федерация, 153045

E-mail: mak1111@bk.ru

**ПЕРЕНОС ПРОТОНА В СИСТЕМЕ ФОСФОРСОДЕРЖАЩАЯ КИСЛОТА – N,N-ДИМЕТИЛ-
ФОРМАМИД ПРИ УЧЕТЕ ВЛИЯНИЯ СРЕДЫ**

Приведен обзор результатов квантово-химических исследований процесса переноса протона в молекулярных и ион-молекулярных комплексах фосфорсодержащих кислот (H_3PO_4 , H_3PO_3 и $CH_3N_2PO_3$) с ДМФА. Обсуждается влияние среды (модель С-РСМ) на энергетические характеристики переноса протона.

Ключевые слова: фосфорсодержащие кислоты, ДМФА, перенос протона, квантово-химический расчёт, эффект растворителя

L.P. Safonova, I.V. Fedorova, M.A. Krestyaninov

Lyubov P. Safonova, Irina V. Fedorova (✉)

Laboratory of Structure and Dynamics of Molecular and Ion-Molecular Solutions, G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of RAS, Akademicheskaya str., 1, Ivanovo, 153045, Russia

E-mail: lps@isc-ras.ru, fiv@isc-ras.ru (✉)

Michael A. Krestyaninov

Laboratory of NMR-spectroscopy and Numerical Investigation Methods of Liquids, G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of RAS, Akademicheskaya str., 1, Ivanovo, 153045, Russia

E-mail: mak1111@bk.ru

PROTON TRANSFER IN PHOSPHORUS-CONTAINING ACID–N,N-DIMETHYLFORMAMIDE SYSTEM WITH GLANCE OF ENVIRONMENT

Proton transfer processes in the molecular and ion-molecular complexes of phosphorus acids (phosphoric H_3PO_4 , phosphorous H_3PO_3 , methylphosphonic $CH_3H_2PO_3$) with N,N-dimethylformamide (DMF) was studied. The potential energy surface (PES) for proton transfer was studied using the B3LYP/6-31++G(d,p) level of theory, and the solvent effect (here DMF) on the PES was included using the conductor polarized continuum model (CPCM). For all cases, the energy profile for proton transfer represents a double well curve, if intermolecular O...O distance for the hydrogen bond considered has a fixed length equal to 2.7 Å. The solvent effect favors a proton transfer in the molecular complexes, but no shift of the equilibrium towards ionic pairs is observed. As a result, the energy values associated with proton transfer are significantly reduced in comparison with those found for the gas phase. The proton transfer in the complexes of H_3PO_4 with DMF is more favored than this process for the cases with H_3PO_3 and $CH_3H_2PO_3$. The probability of proton transfer in the H_3PO_4 -DMF and $(H_3PO_4)_2$ -DMF is nearly identical. On the contrary, the barrier height for transfer in H_3PO_4 -(DMF) $_n$ for $n=1-3$ increases with increasing number of DMF molecules. The energy barrier for proton transfer in the $DMFH^+$ -DMF and H_3PO_4 - $H_2PO_4^-$ is lower than the ones for the molecular complexes.

Key words: phosphorus acids, DMF, proton transfer, quantum chemical calculation, solvent effect

Перенос протона вдоль водородной связи имеет принципиальное значение во многих физических, химических и биохимических процессах. Этим обусловлено большое число как экспериментальных, так и теоретических работ, посвященных изучению данного явления, результаты которых отражены в обзорах [1-8]. Несмотря на это многие аспекты динамики и механизма переноса протона не до конца раскрыты, особенно для растворов фосфорсодержащих кислот в неводных растворителях.

Данная работа является аннотированным обзором результатов более ранних квантово-химических исследований процесса переноса протона между различными молекулами и ионами в системе кислота – N,N-диметилформамид (ДМФА), где кислота – фосфорная H_3PO_4 , фосфористая H_3PO_3 и метилфосфористая $CH_3H_2PO_3$ [9-12]. При этом большее внимание уделено фосфорной кислоте, для которой были рассмотрены те водородно-связанные комплексы, которые наиболее вероятны в конденсированной фазе: H_3PO_4 -(ДМФА) $_n$ (где $n = 1-3$), $(H_3PO_4)_2$, $(H_3PO_4)_2$ – ДМФА, H_3PO_4 – $H_2PO_4^-$, ДМФА H^+ – ДМФА и ДМФА H^+ – H_3PO_4 . При образовании водородной связи между молекулами и ионами в таких изолированных комплексах наблюдается значительный выигрыш в энергии межмолекулярного взаимодействия (табл. 1). Согласно различным критериям образования водо-

родной связи [13], рассчитанные параметры (расстояние O...H, валентный угол O-H...O, энергия водородной связи) указывают на то, что водородные связи во всех изученных комплексах близки к сильным связям [9, 12, 14].

Таблица 1

Энергия межмолекулярного взаимодействия молекулярных и ион-молекулярных комплексов фосфорсодержащих кислот с ДМФА (ΔE , кДж/моль), рассчитанная методом B3LYP/6-31++G(d,p)
Table 1. The binding energies of the molecular and ion-molecular complexes of phosphorus acids with DMF (ΔE , kJ/mol) calculated at the B3LYP/6-31++G(d,p) level

Комплекс	ΔE	Комплекс	ΔE
ДМФА H^+ – H_3PO_4 [9]	-121,73	$(H_3PO_4)_2$ – ДМФА [12]	-166,26
ДМФА H^+ – ДМФА [9]	-150,26	H_3PO_4 – (ДМФА) $_2$	-141,28
H_3PO_4 – $H_2PO_4^-$	-171,96	H_3PO_4 – (ДМФА) $_3$	-195,70
$(H_3PO_4)_2$ [12]	-96,66	H_3PO_3 – ДМФА [14]	-62,04
H_3PO_4 – ДМФА [12]	-62,46	$CH_3H_2PO_3$ – ДМФА [14]	-58,16

К настоящему времени нами также изучены структуры водородно-связанных комплексов фосфористой (H_3PO_3) и метилфосфористой ($CH_3H_2PO_3$) кислот с ДМФА, а также процесс пе-

переноса протона вдоль водородной связи в этих комплексах [10, 14]. Эти данные позволят провести сравнительный анализ энергетических характеристик переноса протона в комплексах в ряду кислот H_3PO_4 , H_3PO_3 и $\text{CH}_3\text{H}_2\text{PO}_3$, отличающихся одной функциональной группой, связанной с фосфором, а именно гидроксильной группой, атомом водорода или метильной группой для соответствующих кислот. При этом степень окисления атома фосфора различна: +5 в фосфорной кислоте и +3 в фосфористой и метилфосфористой кислотах. Также следует учитывать, стерический фактор (достаточно большой объем CH_3 группы в молекуле $\text{CH}_3\text{H}_2\text{PO}_3$ по сравнению с H в молекуле H_3PO_3), который может приводить к ослаблению водородной связи в комплексе $\text{CH}_3\text{H}_2\text{PO}_3$ – ДМФА, а, следовательно, значительно увеличивать энергию, требуемую для переноса протона.

Изменение энергии при переносе протона в водородно-связанных комплексах было рассчитано как в газовой фазе, так и с учетом влияния среды на основе сольватационной модели C-PCM [15].

Среди работ, опубликованных в этом направлении, следует отметить исследования переноса протона в чистой фосфорной [16-18] и фосфористой [19] кислотах. Показано, что механизм и параметры данного процесса этих кислот очень схожи, скорость структурной диффузии в фосфорной кислоте выше, чем в фосфористой кислоте, что является результатом более прочной сетки водородных связей в последней. На основе B3LYP/6-311G(d,p) метода установлено, что между молекулами фосфорной кислоты в циклическом димере образуются короткие и сильные водородные связи ($R(\text{O}\dots\text{O})=2,56 \text{ \AA}$), а сечение поверхности потенциальной энергии переноса протона имеет невысокий энергетический барьер (28,47 кДж/моль) [17]. Переход протона вдоль водородной связи в изолированном димере фосфористой кислоты возможен, если расстояние между двумя атомами кислорода более $2,7 \text{ \AA}$ (метод DFTB)/ $2,8 \text{ \AA}$ (метод расчета PBE) [20]. Причем высота энергетического барьера при переносе протона заметно увеличивается с ростом этого расстояния. На основе метода *ab initio* молекулярной динамики (МД) процесс переноса протона исследован в водных растворах фосфорной кислоты и ее различных анионов [21], ее растворах с имидазолом [22] и мочевиной [23]. Во всех этих системах между молекулами образуются очень сильные водородные связи. В результате переноса протона в системе H_3PO_4 – имидазол в мольном

соотношении 2:1 около 50 % всех молекул кислоты существуют в виде иона H_2PO_4^- [22]. Также, изучен механизм переноса протона в мембране Nafion, сольватированной H_3PO_4 с применением комбинированного подхода, сочетающего квантово-химический метод B3PW91/6-31G(d,p) и метод классической МД [24].

МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

Все квантово-химические расчеты выполнены методом функционала плотности с применением обменно-корреляционного функционала Бекке-Ли-Янга-Парра (B3LYP) [25, 26] и базисным набором 6-31++G(d,p) [27] с использованием пакета программ Gaussian 09 [28]. Учет влияния растворителя (ДМФА) осуществлялся в рамках континуальной модели C-PCM [15].

Моделирование переноса протона в молекулярных и ион-молекулярных комплексах фосфорсодержащих кислот с ДМФА выполнено методом сканирования протонной координаты по поверхности потенциальной энергии (ППЭ) с проведением геометрической оптимизации на каждом шаге ($0,05 \text{ \AA}$). Расчеты были выполнены для двух случаев, когда расстояние между двумя атомами акцепторами протона (R) при переносе протона не фиксировалось, а также когда это расстояние было зафиксированным. Более подробное описание обоих способов расчета можно найти в работах [9, 10, 12]. При переносе протона изученным системам присущи некоторые общие характеристики, а именно:

(а) на потенциальной кривой переноса протона наблюдается один четко выраженный минимум энергии, если расстояние в процессе сканирования не фиксировано (исключение $\text{H}_3\text{PO}_4 - \text{H}_2\text{PO}_4^-$ как в газовой фазе, так и при учете влияния среды, и сольватированный комплекс ДМФАН⁺ – ДМФА);

(б) при расчетах с фиксированным расстоянием увеличение R приводит к переходу от одноячного к двухъячному профилю ППЭ и росту высоты энергетического барьера этого процесса. Подобные результаты также получены при изучении переноса протона в димерах фосфористой кислоты [20] и воды [29].

Изменение энергии при переносе протона (ΔE) рассматривалось как разница между энергиями комплекса с текущими параметрами R_i и δ_i на каждом шаге сканирования ($E_i(R_i, \delta_i)$) и комплекса, соответствующего минимуму на гиперповерхности потенциальной энергии ($E(R, \delta)$) по уравнению (1):

$$\Delta E = E_i(R_i, \delta_i) - E(R, \delta) \quad (1)$$

В качестве координаты переноса протона использовалась величина δ , которая рассчитывалась по соотношению (2):

$$\delta = r_1 - r_2, \quad (2)$$

где r_1 и r_2 – расстояния от атома водорода до атомов кислорода в $O_1-H \dots O_2$ фрагменте.

Для сравнения, мы представляем результаты расчета энергетических профилей ППЭ переноса протона вдоль водородной связи в различных типах комплексов фосфорсодержащих кислот с ДМФА при фиксированном расстоянии $O \dots O$, равном 2,7 Å. При этом расстоянии наблюдается двухъямный профиль ППЭ для всех рассмотренных далее комплексов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Перенос протона в молекулярных и ион-молекулярных комплексах состава 1:1 в системе H_3PO_4 – ДМФА. На рис. 1 показаны сечения ППЭ переноса протона вдоль водородной связи в H_3PO_4 – ДМФА, H_3PO_4 – $H_2PO_4^-$, $DMFH^+$ – ДМФА и $DMFH^+$ – H_3PO_4 при учете сольватации на основе модели С-PCM. Величины энергетического барьера при переносе протона во всех рассмотренных комплексах приведены в табл. 2.

Как видно из рис. 1, приведенные зависимости для H_3PO_4 – ДМФА и $DMFH^+$ – H_3PO_4 асимметричны по отношению к энергетическому барьеру. Первый минимум, отвечающий начальному состоянию, т.е. когда протон связан ковалентной связью с атомом кислорода молекулы кислоты или протонированной молекулы ДМФА, является более глубоким, чем второй. Высота энергетического барьера при переносе протона в сольватированном комплексе H_3PO_4 – ДМФА меньше, чем в $DMFH^+$ – H_3PO_4 (табл. 2).

Кривые ППЭ переноса протона в $DMFH^+$ – ДМФА и H_3PO_4 – $H_2PO_4^-$ симметричны в данных координатах, так как конечное и начальное состояния совпадают. При этом следует отметить, что при переносе избыточного протона от одной молекулы ДМФА к другой наблюдается наименьший энергетический барьер среди всех рассмотренных в данной работе комплексов (табл. 2). Перенос протона с участием молекул ДМФА с низким энергетическим барьером также показан в [30].

Сравнение высот энергетических барьеров при переносе протона в данных комплексах в газовой фазе и рассчитанных с учетом среды на основе модели С-PCM (табл. 2) показало, что учет сольватации приводит к понижению энергетиче-

ского барьера в H_3PO_4 – ДМФА и $DMFH^+$ – H_3PO_4 (особенно в случае первого комплекса) и его росту для H_3PO_4 – $H_2PO_4^-$ и $DMFH^+$ – ДМФА.

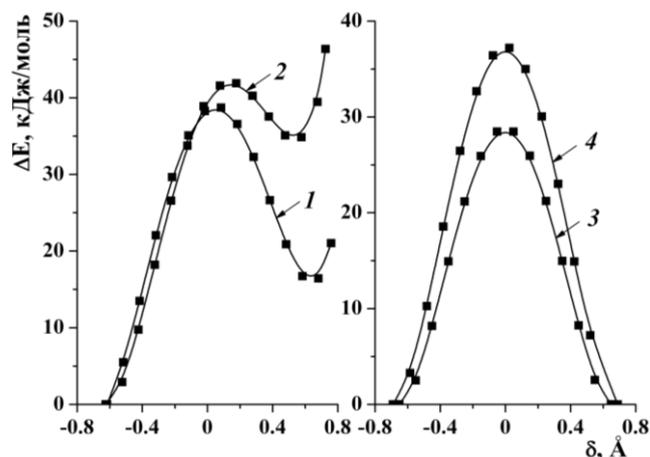


Рис. 1. Изменение энергии при переносе протона в H_3PO_4 –ДМФА (1), $DMFH^+$ – H_3PO_4 (2), $DMFH^+$ –ДМФА (3) и H_3PO_4 – $H_2PO_4^-$ (4) при $R=2,7$ Å, рассчитанное методом B3LYP/6-31++G(d,p) при учете сольватации (ДМФА) на основе модели С-PCM

Fig. 1. Energies for the proton transfer in H_3PO_4 –DMF (1), $DMFH^+$ – H_3PO_4 (2), $DMFH^+$ –DMF (3) and H_3PO_4 – $H_2PO_4^-$ (4) at $R=2.7$ Å calculated at the B3LYP/6-31++G(d,p) level (using the CPCM model)

Таблица 2

Высоты энергетических барьеров при переносе протона ($\Delta E_{\text{барьера}}$, кДж/моль) в молекулярных и ион-молекулярных комплексах фосфорсодержащих кислот с ДМФА при $R=2,7$ Å, рассчитанные методом B3LYP/6-31++G(d,p)

Table 2. The energy barrier heights for the proton transfer ($\Delta E_{\text{barrier}}$, kJ/mol) in the molecular and ion-molecular complexes of phosphorus acids with DMF at $R=2.7$ Å calculated at the B3LYP/6-31++G(d,p) level

Комплекс	$\Delta E_{\text{барьера}}$	
	Газовая фаза	ДМФА (модель С-PCM)
$DMFH^+$ – H_3PO_4 [9]	46,71	41,89
$DMFH^+$ – ДМФА [9]	24,07	28,46
H_3PO_4 – $H_2PO_4^-$ [9]	35,52	37,21
H_3PO_4 – ДМФА	55,48 [9]	38,72
$(H_3PO_4)_2$ – ДМФА [10]	52,12	39,62
H_3PO_4 – $(DMFA)_2$	67,30	46,48
H_3PO_4 – $(DMFA)_3$	68,54	50,87
H_3PO_3 – ДМФА [10]	58,87	41,21
$CH_3H_2PO_3$ – ДМФА [10]	65,90	48,80

Влияние размера комплекса на энергетические характеристики переноса протона в системе H_3PO_4 – ДМФА. Энергетические профили ППЭ переноса протона в водородно-связанных

комплексах $\text{H}_3\text{PO}_4 - (\text{DMF})_n$ (где $n = 1-3$) и $(\text{H}_3\text{PO}_4)_2 - \text{DMF}$ при учете влияния растворителя ДМФА (модель С-PCM) показаны на рис. 2. Здесь следует отметить, что в комплексе $\text{H}_3\text{PO}_4 - (\text{DMF})_n$ в зависимости от n в образовании водородной связи участвует различное число ОН групп молекулы кислоты. На рис. 2 приведен энергетический профиль ППЭ переноса протона вдоль одной из образованных водородных связей. В комплексе $(\text{H}_3\text{PO}_4)_2 - \text{DMF}$ рассмотрена водородная связь между димером фосфорной кислоты и ДМФА. Во всех случаях на потенциальной кривой присутствует энергетический барьер, который разделяет два асимметричных минимума, соответствующих устойчивым положениям протона на линии водородной связи, т.е. когда протон находится у атома кислорода либо кислоты либо ДМФА. Энергетически наиболее выгодным является начальное состояние комплексов, т.е. когда протон находится ближе к атому кислорода молекулы кислоты.

Увеличение числа молекул ДМФА в комплексах $\text{H}_3\text{PO}_4 - (\text{DMF})_n$ (где $n = 1-3$) приводит к заметному росту энергетического барьера при переносе протона. При этом высота энергетического барьера, полученная с учетом среды на основе модели С-PCM меньше, чем в газовой фазе (табл. 2).

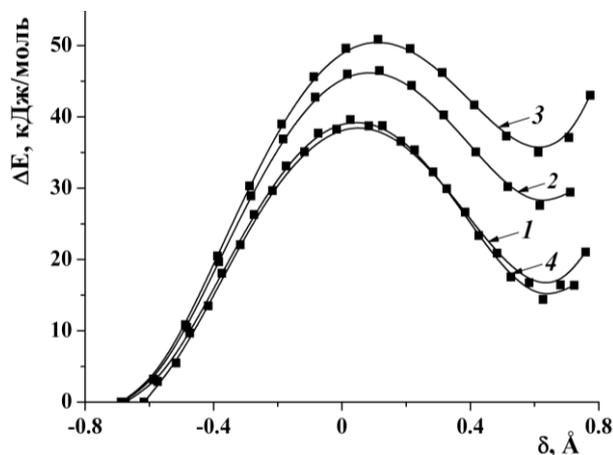


Рис. 2. Изменение энергии при переносе протона в $\text{H}_3\text{PO}_4 - \text{DMF}$ (1), $\text{H}_3\text{PO}_4 - (\text{DMF})_2$ (2), $\text{H}_3\text{PO}_4 - (\text{DMF})_3$ (3) и $(\text{H}_3\text{PO}_4)_2 - \text{DMF}$ (4) при $R=2,7 \text{ \AA}$, рассчитанное методом B3LYP/6-31++G(d,p) при учете сольватации (ДМФА) на основе модели С-PCM

Fig. 2. Energies for the proton transfer in $\text{H}_3\text{PO}_4 - \text{DMF}$ (1), $\text{H}_3\text{PO}_4 - (\text{DMF})_2$ (2), $\text{H}_3\text{PO}_4 - (\text{DMF})_3$ (3) and $(\text{H}_3\text{PO}_4)_2 - \text{DMF}$ (4) at $R=2.7 \text{ \AA}$ calculated at the B3LYP/6-31++G(d,p) level (using the CPCM model)

В то же время увеличение числа молекул H_3PO_4 не приводит к существенному изменению профиля ППЭ переноса протона в $\text{H}_3\text{PO}_4 - \text{DMF}$

и $(\text{H}_3\text{PO}_4)_2 - \text{DMF}$, разница в значениях энергетических барьеров пренебрежимо мала, т.е. перенос протона в обоих комплексах равновероятен. Авторы [17] получили подобные результаты при изучении переноса протона в кластерах фосфорной кислоты, содержащих от 2 до 6 молекул. В частности, с ростом числа молекул в кластере наблюдается незначительное изменение энергетического барьера при переносе протона, тогда как его высота резко уменьшается для кластера крупного размера $(\text{H}_3\text{PO}_4)_6$, который авторы называют критическим.

Влияние строения фосфорсодержащих кислот на процесс переноса протона в комплексах с ДМФА. Изменение энергии при переносе протона в комплексах H_3PO_4 , H_3PO_3 и $\text{CH}_3\text{H}_2\text{PO}_3$ с ДМФА в сольватационной модели С-PCM показано на рис. 3.

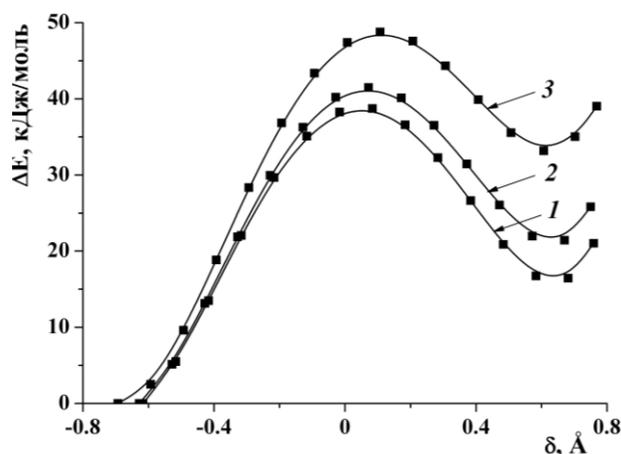


Рис. 3. Изменение энергии при переносе протона в комплексах H_3PO_4 (1), H_3PO_3 (2) и $\text{CH}_3\text{H}_2\text{PO}_3$ (3) с ДМФА при $R=2,7 \text{ \AA}$, рассчитанное методом B3LYP/6-31++G(d,p) при учете сольватации (ДМФА) на основе модели С-PCM

Fig. 3. Energies for the proton transfer in the complexes of H_3PO_4 (1), H_3PO_3 (2) and $\text{CH}_3\text{H}_2\text{PO}_3$ (3) with DMF at $R=2.7 \text{ \AA}$ calculated at the B3LYP/6-31++G(d,p) level (using the CPCM model)

В целом, форма ППЭ переноса протона при переходе от одной кислоты к другой в комплексах с ДМФА изменяется незначительно. Для всех комплексов на сечении потенциальной кривой имеется асимметричный двойной минимум по отношению к энергетическому барьеру. Начальное состояние каждого рассмотренного комплекса, где протон ковалентно связан с атомом кислорода молекулы кислоты имеет минимальное значение энергии. Высота барьера при переносе протона в комплексах с ДМФА увеличивается в ряду кислот $\text{H}_3\text{PO}_4 < \text{H}_3\text{PO}_3 < \text{CH}_3\text{H}_2\text{PO}_3$ (табл. 2). Эти результаты коррелируют с энергетическими характеристиками водородно-связанных комплексов рассматриваемых кислот (табл. 1).

Учет сольватации на основе модели С-РСМ благоприятствует процессу переноса протона в данных комплексах, о чем свидетельствуют более низкие значения высот энергетических барьеров (табл. 2) в сравнении с величинами, полученными в газовой фазе.

Таким образом, процесс переноса протона вдоль водородной связи во всех изученных молекулярных и ион-молекулярных комплексах фосфорсодержащих кислот (H_3PO_4 , H_3PO_3 и $CH_3H_2PO_3$) с ДМФА при расчете с фиксированным расстоянием между двумя атомами акцепторами протона $R = 2,7 \text{ \AA}$ возможен. Учет сольватации приводит к значительному понижению энергии при переносе протона во всех молекулярных комплексах H_3PO_4 , H_3PO_3 и $CH_3H_2PO_3$ с ДМФА, но не к смещению равновесия в сторону ионных форм. Перенос протона в комплексе фосфорной кислоты

энергетически более выгоден, чем в комплексах других изученных фосфорсодержащих кислот.

Увеличение числа молекул ДМФА в комплексах $H_3PO_4 - (DMFA)_n$ (где $n = 1 \div 3$) приводит к заметному росту энергетического барьера при переносе протона, тогда как вторая молекула кислоты в $(H_3PO_4)_2 - DMFA$ не оказывает существенного влияния на этот процесс.

Ион-молекулярные комплексы $DMFAN^+ - DMFA$ и $H_3PO_4 - H_2PO_4^-$ имеют более низкие энергетические барьеры при переносе протона по сравнению с молекулярными комплексами.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Грант № 14-03-00481, 15-43-03088).

ЛИТЕРАТУРА

- Jarczewski A., Hubbard C.D. // J. Mol. Struct. 2003. V. 649. P. 287–307.
- Fillaux F., Cousson A., Gutmann M.J. // Pure Appl. Chem. 2007. V. 79. N 6. P. 1023–1039.
- Shevchuk R., Agmon N., Rao F. // J. Chem. Phys. 2014. V. 140. P. 244502 (1-8).
- Sobczyk L., Czarnik-Matusiewicz B., Rospenk M., Obrzud M. // J. Atom. Mol. Opt. Phys. 2012. Article ID 217932. P. 1–10.
- Chaiwongwattana S., Phonyiem M., Vchirawongkwin V. // J. Comput. Chem. 2012. V. 33. P. 175–188.
- Базилевский М.В., Венер М.В. // Успехи химии. 2003. Т. 72. С. 3–39.
- Blake R.S., Monks P.S., Ellis A.M. // Chem. Rev. 2009. V. 109. P. 861–896.
- Kreuer K.-D., Paddison S.J., Spohr E., Schuster M. // Chem. Mater. 2004. V. 104. P. 4637–4678.
- Крестьянинов М.А., Киселев М.Г., Сафонова Л.П. // Журн. физ. химии. 2015. Т. 89. № 4. С. 621–628.
- Федорова И.В., Хатунцева Е.А., Крестьянинов М.А., Сафонова Л.П. // Журн. физ. химии. 2016. Т. 90. № 2. С. 190–196.
- Федорова И.В., Киселев М.Г., Сафонова Л.П. // Ж. физ. химии. 2011. Т. 85. №11. С. 2057–2062.
- Fedorova I.V., Krestyaninov M.A., Kiselev M.G., Safonova L.P. // J. Mol. Struct. 2016. V. 1106. P. 424–429.
- Grabowski S.J. (ed.). Hydrogen Bonding - New Insights. Lodz.: Springer. 2006. 536 p.
- Хатунцева Е.А., Крестьянинов М.А., Федорова И.В. // Ж. физ. химии. 2015. Т. 89. № 12. С. 1904–1910.
- Cossi M., Rega N., Scalmani G., Barone V. // J. Comp. Chem. 2003. V. 24. P. 669–681.
- Vilciauskas L., Tuckerman M.E., Bester G. // Nature Chemistry. 2012. V. 4. P. 461–466.
- Vilciauskas L., Paddison S.J., Kreuer K.-D. // J. Phys. Chem. A. 2009. V. 113. P. 9193–9201.
- Frick B., Vilciauskas L., Deen P.P., Lyonard S. // Solid State Ionics. 2013. V. 252. P. 26–33.
- Schuster M., Kreuer K.-D., Steininger H., Maier J. // Solid State Ionics. 2008. V. 179. P. 523–528.

REFERENCES

- Jarczewski A., Hubbard C.D. // J. Mol. Struct. 2003. V. 649. P. 287–307.
- Fillaux F., Cousson A., Gutmann M.J. // Pure Appl. Chem. 2007. V. 79. N 6. P. 1023–1039.
- Shevchuk R., Agmon N., Rao F. // J. Chem. Phys. 2014. V. 140. P. 244502 (1-8).
- Sobczyk L., Czarnik-Matusiewicz B., Rospenk M., Obrzud M. // J. Atom. Mol. Opt. Phys. 2012. Article ID 217932. P. 1–10.
- Chaiwongwattana S., Phonyiem M., Vchirawongkwin V. // J. Comput. Chem. 2012. V. 33. P. 175–188.
- Bazilevskiy M.V., Vener M.V. // Russ. Chem. Rev. 2003. V. 72. P. 1–33.
- Blake R.S., Monks P.S., Ellis A.M. // Chem. Rev. 2009. V. 109. P. 861–896.
- Kreuer K.-D., Paddison S.J., Spohr E., Schuster M. // Chem. Mater. 2004. V. 104. P. 4637–4678.
- Krest'yaninov M.A., Kiselev M.G., Safonova L.P. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2015. V. 89. N 4. P. 608–615.
- Fedorova I.V., Khatuntseva E.A., Krest'yaninov M.A., Safonova L.P. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2016. V. 90. N 2. P. 293–299.
- Fedorova I.V., Kiselev M.G., Safonova L.P. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2011. V. 85. N 11. P. 1917–1922.
- Fedorova I.V., Krest'yaninov M.A., Kiselev M.G., Safonova L.P. // J. Mol. Struct. 2016. V. 1106. P. 424–429.
- Grabowski S.J. (ed.). Hydrogen Bonding - New Insights. Lodz.: Springer. 2006. 536 p.
- Khatuntseva E.A., Krest'yaninov M.A., Fedorova I.V. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2015. V. 89. N 12. P. 2264–2269.
- Cossi M., Rega N., Scalmani G., Barone V. // J. Comp. Chem. 2003. V. 24. P. 669–681.
- Vilciauskas L., Tuckerman M.E., Bester G. // Nature Chemistry. 2012. V. 4. P. 461–466.
- Vilciauskas L., Paddison S.J., Kreuer K.-D. // J. Phys. Chem. A. 2009. V. 113. P. 9193–9201.
- Frick B., Vilciauskas L., Deen P.P., Lyonard S. // Solid State Ionics. 2013. V. 252. P. 26–33.
- Schuster M., Kreuer K.-D., Steininger H., Maier J. // Solid State Ionics. 2008. V. 179. P. 523–528.

20. **Joswig J.-O., Hazebroucq S., Seifert G.** // J. Mol. Struct: THEOCHEM. 2007. V. 816. P. 119–123.
21. **Tang E., Tommaso D., de Leeuwa N.H.** // J. Chem. Phys. 2009. V. 130. P. 234502 (1-9).
22. **Vilciauskas L., Tuckerman M. E., Melchior J.P.** // Solid State Ionics. 2013. V. 252. P. 34–39.
23. **Morrison C.A., Siddick M.M., Camp P.J.** // J. Am. Chem. Soc. 2005. V. 127. P. 4042–4048.
24. **Yan L., Zhu S., Ji X., Lu W.** // J. Phys. Chem. B. 2007. V. 111. P. 6357–6363.
25. **Lee Ch., Yang W., Parr R.G.** // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 785–789.
26. **Becke A.D.** // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 5648–5652.
27. **Ditchfield R., Hehre W.J., Pople J.A.** // J. Chem. Phys. 1971. V. 54. P. 724–728.
28. **Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al.** Gaussian 09. Revision A.02. Gaussian, Inc. Wallingford CT. 2009.
29. **Li T., Wlaschin A., Balbuena P.B.** // Ind. Eng. Chem. Res. 2001. V. 40. P. 4789–4800.
30. **Wieczorek W., Zukowska G., Borkowska R.** // Electrochim. Acta. 2001. V. 46. P. 1427–1438.
20. **Joswig J.-O., Hazebroucq S., Seifert G.** // J. Mol. Struct: THEOCHEM. 2007. V. 816. P. 119-123.
21. **Tang E., Tommaso D., de Leeuwa N.H.** // J. Chem. Phys. 2009. V. 130. P. 234502 (1-9).
22. **Vilciauskas L., Tuckerman M. E., Melchior J.P.** // Solid State Ionics. 2013. V. 252. P. 34-39.
23. **Morrison C.A., Siddick M.M., Camp P.J.** // J. Am. Chem. Soc. 2005. V. 127. P. 4042-4048.
24. **Yan L., Zhu S., Ji X., Lu W.** // J. Phys. Chem. B. 2007. V. 111. P. 6357-6363.
25. **Lee Ch., Yang W., Parr R.G.** // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 785-789.
26. **Becke A.D.** // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 5648-5652.
27. **Ditchfield R., Hehre W.J., Pople J.A.** // J. Chem. Phys. 1971. V. 54. P. 724-728.
28. **Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al.** Gaussian 09. Revision A.02. Gaussian, Inc. Wallingford CT. 2009.
29. **Li T., Wlaschin A., Balbuena P.B.** // Ind. Eng. Chem. Res. 2001. V. 40. P. 4789-4800.
30. **Wieczorek W., Zukowska G., Borkowska R.** // Electrochim. Acta. 2001. V. 46. P. 1427-1438.

*Поступила в редакцию 02.03.2016
Принята к опубликованию 06.05.2016*

*Received 02.03.2016
Accepted 06.05.2016*