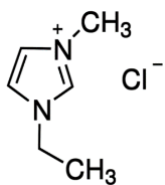


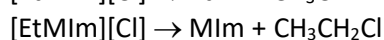
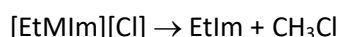
**Расчет константы равновесия и константы скорости разложения ионной жидкости
1-этил-3-метилимидазолий хлорид, [EtMIm][Cl]**

При взаимодействии катиона [EtMIm]⁺ и аниона [Cl]⁻



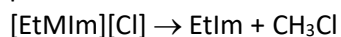
(Et – этил, М – метил, Im – имидазол)

образуется ионная жидкость 1-этил-3-метилимидазолий [хлорид, представляющая собой нейтральную ионную пару [EtMIm][Cl]. Экспериментально установлено, что при нагревании ионной жидкости наряду с испарением происходит ее разложение



с образованием алкилимидазолов и алкилхлоридов. Отщепление алкильных групп происходит преимущественно по S_N2 механизму.*

Цель настоящей работы – рассчитать константу равновесия и константу скорости реакции разложения



Во всех расчетах использовать метод B3LYP/6-31G(d,p) с соответствующим масштабирующим множителем для частот колебаний.

1. Оптимизировать геометрию ионов [EtMIm]⁺ и [Cl]⁻ и продуктов разложения EtIm и CH₃Cl.
2. Определить самую стабильную конформацию ионной пары [EtMIm][Cl] рассматривая различные относительные положения ионов [EtMIm]⁺ и [Cl]⁻.
3. Определить переходное состояние для реакции разложения используя метод QST2 или QST3.
4. Рассчитать константу равновесия при T = 298.15 и 400 K.
5. Рассчитать константу скорости при T = 298.15 и 400 K.

*

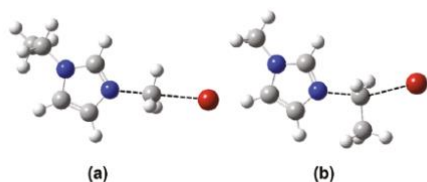


Figure 8. Transition states for the S_N2 alkyl abstraction of (a) methyl and (b) ethyl by the bromide ion at the M06/6-31+G(d,p) level of theory.