

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КАТИОНОВ НА ГИДРАТАЦИЮ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.Г. Рожкова, Е.В. Бутырская, М.В. Рожкова, В.А. Шапошник

Выполнено компьютерное моделирование структуры и ИК спектров систем этиленгликоль - 9 молекул воды и этиленгликоль - 9 молекул воды - M^+ , где $M^+=Na^+,K^+$. Наличие катионов изменяет структуру гидратной оболочки этиленгликоля, что приводит к уменьшению энергии активации самодиффузии этиленгликоля в растворе с добавками солей по сравнению с ее значением в водно-гликолевом растворе.

Ключевые слова: гидратация, водный раствор этиленгликоля, водно-солевой раствор этиленгликоля, компьютерное моделирование