

## ***Ab-initio* исследование сольватации лития в ацетонитриле**

© Эркабаев Александр Мухтарович,<sup>1+</sup> Попов Сергей Эдуардович<sup>2\*</sup>  
и Бушкова Ольга Викторовна<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН.

Ул. С. Ковалевской/Академическая/Комсомольская 22/20/14. 620219. Екатеринбург, ГСП-146.

Тел.: (8343) 362-34-89. E-mail: aerkabaev@mail.ru

<sup>2</sup> Уральский федеральный университет. Ул. Мира 19. г. Екатеринбург, 620002.

Тел.: (8800) 100-50-44. E-mail: contact@ustu.ru

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** литий, ацетонитрил, сольватация, *ab-initio*.

### **Аннотация**

Квантово-химическими методами изучены структуры и энергетические характеристики иона лития, сольватированного молекулами ацетонитрила. Рассмотрено образование первой и второй координационной сферы. Проведена оценка точности расчетов и выбор базисного набора. Для получения корректных результатов расчетов был выбран метод RHF+MP2 с базисом 6-311G\*\*. Установлено, что возможно формирование любого сольвата  $\text{Li}^+(\text{CH}_3\text{CN})_n$  ( $n = 1-6$ ) с молекулами ацетонитрила в первой координационной сфере, однако анализ их структурных и энергетических параметров указывает на то, что наиболее вероятным является сольват с  $n = 4$ . Показано, что  $n = 6$  соответствует максимально возможному числу молекул ацетонитрила в первой координационной сфере катиона лития.

Установлено, что формирование второй координационной сферы  $\text{Li}^+$  в ацетонитриле маловероятно. Для каждого устойчивого кластера  $\text{Li}^+(\text{CH}_3\text{CN})_n$  рассчитан полный ИК спектр. Получена новая информация о проявлении геометрии сольвата в колебательном спектре. Наиболее характеристичные полосы поглощения, вызванные колебаниями  $\text{Li}^+$  и координированными молекулами растворителя как целого, относятся к длинноволновому диапазону спектра ( $0-700 \text{ см}^{-1}$ ). Каждый устойчивый сольватный комплекс характеризуется индивидуальным набором полос поглощения в этой области, что может быть использовано для идентификации состава и геометрии сольвата.