

*Булавін В.І., Крамаренко А.В., Україна, Харків*

### **ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ІОНІЗАЦІЇ ГІДРОГЕНФЛЮОРИДУ У МЕТАНОЛІ ТА ЕТАНОЛІ**

Розраховано термодинамічні параметри іонізації HF у метанолі та етанолі при 298,15 К на підставі рівняння Ізмайлова. Необхідні для розрахунку величини визначені методом *ab initio* у розширеному базисі (6-31G\*\*) і за модифікованою двошаровою моделлю сольватації іонів.

*Булавин В.И., Крамаренко А.В., Украина, Харьков*

### **ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИОНИЗАЦИИ ФТОРОВОДОРОДА В МЕТАНОЛЕ И ЭТАНОЛЕ**

Рассчитаны термодинамические параметры ионизации HF в метаноле и этаноле при 298,15 К на основании уравнения Измайлова. Необходимые для расчёта величины определены методом *ab initio* в расширенном базисе (6-31G\*\*) и по модифицированной двухслойной модели сольватации ионов.

*Bulavin V.I., Kramarenko A.V., Ukraine, Kharkov*

### **THERMODYNAMIC CHARACTERISTIC OF IONIZATION FOR HYDROGEN FLUORIDE IN METHANOL AND ETHANOL**

The thermodynamic parameters for ionization of hydrogen fluoride in methanol and ethanol at 298,15 K has been calculated using Izmailov equation. Data necessary for calculation were obtained with modified double-layer model for ion solvation, and also by *ab initio* method in extended basis (6-31G\*\*).