

ХІМІЧНІ ТЕХНОЛОГІЇ

УДК 620.3: 66.061.34 + 543.9

DOI <https://doi.org/10.32782/2663-5941/2024.1.2/14>

Воробйова В.І.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Андрух Ю.М.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Морозова Д.О.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Земцова В.В.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Васильєв Г.С.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Скиба М.І.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

Скиба Ю.М.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

ДОБІР СКЛАДОВИХ ДЛЯ СИНТЕЗУ ЕКОЛОГІЧНИХ ІОННИХ РІДИН НОВОГО ПОКОЛІННЯ НА ОСНОВІ КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ

У статті визначено індекси реакційної здатності при формуванні низькотемпературних евтектичних розчинників на основі квантово-хімічно визначених енергетичних та структурних параметрів молекул переліку сполук: молочна кислота, сечовина, бетаїн, холін хлорид, ксилітол, пролін. Теорію функціонала густини та визначення електронної структури методом Хартрі-Фока використано для інтерпретації і обґрунтування квантово-хімічних методів розрахунків. Проаналізовано енергетичні параметри досліджуваних сполук, а саме значення енергії вищої зайнятої молекулярної орбіталі ($E_{\text{ВЗМО}}$). Встановлено, що донорна здатність сполук зменшується у напрямку Ксилітол (9.4573 eV) < Пролін (-9.6873) < Холін хлорид (-9.8745 eV) < Бетаїн (-10.0103eV) < Сечовина (-10.5173eV) < Молочна кислота (-11.4279 eV). За аналізом індексу електрофільності акцепторна здатність сполук при формуванні НЕР наступна: Молочна кислота < Пролін < Холін хлорид < Ксилітол < Бетаїн < Сечовина. Найнижчі значення величини енергії цілини молекулярних орбіталей (ΔE) у холін хлориду (10.123eV), ксилітолу (9.733 eV) та проліну (10.65 eV). Досліджено шість НЕР: НЕР-1 Бетаїн-Сечовина; НЕР-2 Холін Хлорид-Сечовина; НЕР-3 Бетаїн -Молочна кислота; НЕР 4 Пролін -Ксилітол; НЕР-5 Холін Хлорид-Пролін; НЕР-6 Холін хлорид-Ксилітол. Порядок збільшення електронегативності для НЕР наступний: $-3,99 > -4,24 > -4,60 > -4,71 > -5,24 > -5,38 = \text{НЕР-1} > \text{НЕР-4} > \text{НЕР-6} > \text{НЕР-5} > \text{НЕР-3} > \text{НЕР-2}$. Найвищий індекс електрофільності у НЕР-2 холін хлорид сечовина (1,34 eV) та НЕР-3 бетаїн-молочна кислота (1.311 eV). Серед розчинників, НЕР-5 (Холін Хлорид-Пролін) та НЕР-6 (Холін хлорид-Ксилітол) є найкращим розчинником із найменшою енергетичною щільною (9,93 та 9,70 eV), найвищим хімічним потенціалом, хімічною м'якістю (0,20 eV) і помірним індексом електрофільності (1.179 та 1.151eV) і відносно меншою електронегативністю (-0,19 eV).

Ключові слова: «зелені» розчинники, низькотемпературні евтектичні розчинники, квантово-хімічні розрахунки, індекси реакційної здатності, електронегативність, індексу електрофільності, хімічна твердість, м'якість.

Постановка проблеми. Низькотемпературні евтектичні розчинники (НЕР) – рідини, що складаються з двох/трьох компонентів, здатних формувати евтектичну суміш з точкою плавлення значно нижче, ніж у кожного окремого компонента [1–3]. Ці розчинники були широко визнані екологічно чистими заміниками органічних розчинників для різних галузей, таких як електрохімія [2], каталіз [3] екстракція природних органічних сполук [4], синтез наноматеріалів [5]. Основними перевагами НЕР є низька вартість, простота синтезу, низька токсичність, біосумісність і біорозкладність. При формуванні НЕР одна сполука виступає як донор, а інша як акцептор для формування водневого зв'язку [4]. Ефективність утворення НЕР сполуками-донорами залежить від її просторової (молекулярної та електронної) структури, відповідно від певних індексів реакційної здатності (ІРЗ). Експериментальний підбір складових для синтезу НЕР є довгим та економічно не вигідним. Використовуючи теоретичні квантово-хімічні розрахунки можна спрогнозувати реакційну здатність/спроможність сполук до утворення зв'язку та вірогідні точки (центри) міжмолекулярної взаємодії як в межах представників сполук одного гомологічного ряду, так і в рамках різних класів органічних сполук [5]. Тому, на думку багатьох дослідників [6–7], першочерговим при створенні нових НЕР є визначення реакційної здатності сполук при утворенні НЕР, які можна спрогнозувати, виходячи з оцінки реакційної здатності органічних молекул, отриманих в результаті квантово-хімічних розрахунків електронної та енергетичної характеристики молекул. Доцільно попередньо перед синтезом нових НЕР, оцінити та обрати більш реакційно здатні сполуки, що можуть виступати як сполуками-донорами при формуванні НЕР. До того ж, напівемпіричні методи, засновані на теорії функціонала густини, також в останній час все більше залучається при створенні нових НЕР [8]. А саме розглядають енергетичні параметри $E_{\text{ВЗМО}}$ сполуки донора, та $E_{\text{НВМО}}$ акцептора для прогнозування ефективності формування НЕР. Використовуючи комп'ютерне моделювання за допомогою програмного забезпечення COSMO-RS, що є інструментом для прогнозування полярності та центів для взаємодії можна спрогнозувати реакційні центри при формуванні НЕР.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Квантово-хімічні методи розрахунків (КХР) в органічній хімії сприяють розробці теоретичних передумов підбору і цілеспрямованого синтезу новітніх НЕР. Використовуючи обчислювальні методи квантової хімії, в ряді публікацій пред-

ставлено інформацію електронної будови молекул, що виступають як донори водневого зв'язку [9–11]. Вивчені системи холіну хлорид – карбоксильні кислоти/поліоли. В той же час, системи на основі батаїну, ксилітолу, проліну є не вивченими.

Мета роботи – на основі квантово-хімічних розрахунків провести добір складових для синтезу екологічних іонних рідин нового покоління для подальшого їх використання у хімічній технології. Визначити квантово-хімічних характеристик складових та евтектичної системи на основі параметрів енергії ВЗМО ($E_{\text{ВЗМО}}$) та НВМО ($E_{\text{НВМО}}$), електро-негативності (χ), індексу електрофільності (ω), хімічної жорсткості (η) та м'якості (S). Визначення σ -профілю для компонентів НЕР стане теоретичною основою для подальшого вивчення розчинності відносно інших органічних сполук.

Виклад основного матеріалу. Методика експериментальних досліджень

Прогнозна оцінка реакційної здатності ряду органічних сполук була проведена в програмному середовищі HyperChem. Оптимізація виконана за допомогою напівемпіричного методу з розширеним методом РМЗ. Для цього використовувалися силові поля, такі як ММ+ (засновані на ММ2). Реакційну здатність сполук оцінювали по електронним характеристикам досліджуваних структур: енергії ВЗМО ($E_{\text{ВЗМО}}$) та НВМО ($E_{\text{НВМО}}$) та розрахованих на їх основі індексів реакційної здатності. Основний зв'язок розрахованої енергії молекули методом функціоналу густини та її хімічної реактивності представлено у праці [11], який пов'язує хімічний потенціал (μ) із першою похідною енергії по відношенню числа електронів, а отже і з електронегативністю (χ) взятую із протилежним знаком [13]:

$$\mu = -\chi = \left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_{v(r)} \quad (1)$$

Далі використовували концепцію хімічної жорсткості, яку визначають другою похідною енергії по відношенню до електронів, тобто [14–15]:

$$\eta = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial N^2} \right)_{v(r)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{v(r)} \quad (2)$$

Відповідно до концепції Пірсона і Парра [13], слід вказати, що, припускаючи квадратичну залежність між енергією та числом електронів рівняння можна [1] записати у вигляді:

$$\chi = -\mu = \left(\frac{I + A}{2} \right) \quad (3)$$

$$\eta = \left(\frac{I - A}{2} \right) \quad (4)$$

$$\sigma = \frac{1}{\eta} \quad (5)$$

Тоді в термінах теорії молекулярних орбіталей представлені наближені визначення з використанням поняття спорідненості до електрону (A) і енергії іонізації (I). Відповідно для будь-якого хімічного виду взаємодії (атом, іон або молекула) електронегативність (χ) та жорсткість (η), розраховуються відповідно до виразів:

$$\eta = \frac{E_{ВЗМО} - E_{НВМО}}{2} \text{ та } \chi = \frac{E_{ВЗМО} + E_{НВМО}}{2} \quad (6)$$

Електрофільність можна записати через потенціал іонізації та спорідненість до електрона. Нуклеофільність (ε) є фізично зворотною величиною електрофільності ($1/\omega$).

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta} = \frac{\chi^2}{2\eta} \quad (7)$$

$$\varepsilon = \frac{1}{\omega} \quad (8)$$

Параметри, які були визначені вище, є найбільш важливими параметрами, розглянутими в наукових дослідженнях [13–45] при доборі складових для синтезу екологічних іонних рідин нового покоління.

Отримані експериментальні результати.

У таблиці 1 представлені складові для формування НЕР. Розраховано індекси реакційної здатності (табл. 2, 3) окремих складових та σ -профіль (табл. 3) сполук.

Значення енергії ВЗМО ($E_{ВЗМО}$) часто пов'язують зі здатністю молекули віддавати електрон (тобто $E_{ВЗМО}$ виступає в якості донора електронів), в той час як $E_{НВМО}$ вказує на здатність молекули приймати електрон. Тобто сполуки із більшим значенням цього параметра мають більшу здатність до утворення НЕР.

Таблиця 2

Енергетичні параметри молекул

Сполуки	$E_{ВЗМО}$ (eV)	$E_{НВМО}$ (eV)	$\Delta E = \text{HOMO-LUMO}$
Молочна кислота	-11.4279	0.6233	12.05
Сечовина	-10.5173	2.0243	12.54
Бетаїн	-10.0103	0.93854	12.55
Холін хлорид	-9.8745	0.2489	10.123
Ксилітол	-9.4573	0.2765	9.733
Пролін	-9.6873	-0.9687	10.65

Зі збільшенням значення $E_{ВЗМО}$ досліджуваних сполук їх реакційна ефективність зростає: Ксилітол (9.4573 eV) < Пролін (-9.6873) < Холін хлорид (-9.8745 eV) < Бетаїн (-10.0103eV) < Сечовина (-10.5173eV) < Молочна кислота (-11.4279 eV). Із досліджуваних сполук найкращими донорами є холін хлорид, ксилітол та пролін. Зі зменшенням величини енергії щільності молекулярних орбіталей (ΔE) досліджуваних сполук їх донорна ефектив-

Таблиця 1

Системи НЕР

Скорочення	Акцептор водневого зв'язку	Структурна формула	Донор водневого зв'язку	Структурна формула	Співвідношення сполук
НЕР-1	Бетаїн		Сечовина		1:2
НЕР-2	Холін Хлорид		Сечовина		1:2
НЕР-3	Бетаїн		Молочна кислота		1:2
НЕР-4	Пролін		Ксилітол		5:1
НЕР-5	Холін Хлорид		Пролін		1:1
НЕР-6	Холін хлорид		Ксилітол		5:2

Індекси реакційної здатності молекул

Сполуки	Потенціал іонізації	Ядерної подібності до електронів	Електронегативність χ	Жорсткість μ	М'якість σ	Індекс електрофільності ω	Індекс електрофільності ε
Молочна кислота	11.4279	0.6233	5.4023	6.0256	0.1659	1.3505	0.7404
Сечовина	10.5173	2.0243	4.2465	6.2708	0.1594	1.06162	0.9419
Бетаїн	10.0103	0.93854	4.5358	5.47442	0.1826	1.13397	0.8818
Холін хлорид	9.8745	0.2489	4.8128	5.0617	0.1975	1.2032	0.8311
Ксилітол	9.4573	0.2765	4.5904	4.8669	0.2054	1.1476	0.8713
Пролін	9.6873	0.9687	5.2054	4.4819	0.2231	1.30135	0.7684

ність зростає. Найнижчі значення у холін хлориду (10.123eV), ксилітолу (9.733 eV) та проліну (10.65 eV).

Абсолютна електронегативність (χ) є одним з основних параметрів, що характеризує здатність молекул до хімічної взаємодії. Вважається, що індекс електрофільності корелює із електронегативністю та жорсткістю, тоді як нуклеофільність є оберненою величиною. Чим вище значення електрофільності, тим більше здатна молекула приймати електрони. Таким чином, при передбаченні реакційної здатності для утворення НЕР, органічні сполуки із вираженими нуклеофільними властивостями характеризуються меншим значенням електронегативності (χ) та індексу нуклеофільності (ω), в той час як ефективний електрофіл проявляє високі значення μ та індексу електрофільності (ω). Отже, якщо досліджувані сполуки порівнювати між собою і розглядати їх як акцептори водневого зв'язку при утворенні НЕР, то більш оптимальним є застосування холін хлориду, та проліну.

На другому етапі роботи оцінювали КХР параметри НЕР. Припускали, що взаємодія сполук відбувається відповідно до уявлень *Пірсона і Парра* [10] і тому було представлено з концепції методу кінцевих різниць в залежності від спорідненості до електрону (A) і енергії іонізації (I) будь-яких хімічних видів (атом, іон або молекула). Тобто ефективність взаємодії оцінена використовуючи $E_{ВЗМО}$ донора і $E_{НВМО}$ акцептора при формуванні НЕР (таблиця 3). Порядок електронегативності наступний: $-3,99 > -4,24 > -4,60 > -4,71 > -5,24 > -5,38$ як НЕР-1 > НЕР-4 > НЕР-6 > НЕР-5 > НЕР-3 > НЕР-2.

Найвищий індекс електрофільності у НЕР-2 (1,34 eV), наведений у таблиці 3.

З таблиці 5 чітко видно, що позитивні полярні центри представлені негативними значеннями σ , і навпаки для негативних зон полярності. Негативні та позитивні області вказують на прогнозний ефект притягання та відштовхування відповідно, і чим більші ці області, тим очікуваніше сильніший ефект. Утворення водневих зв'язків між холін хлоридом або бетаїном і сечовиною можливе відповідно по реакційним центрам, що показано в табл. 5 для досліджуваних сполук. Три основні області включають область донорних центрів, неполярну область і область центрів акцепторів.

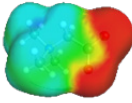
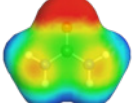
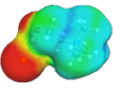
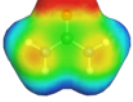
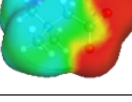
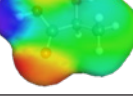
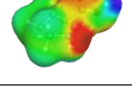
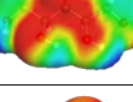
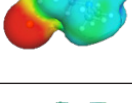
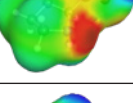
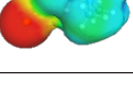
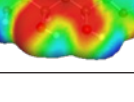
Висновки. В результаті квантово-хімічних розрахунків електронних і енергетичних характеристик молекул проведено оцінку реакційної здатності складових для формування НЕР за наступними індексами: значення енергетичних параметрів ($E_{ВЗМО}$ та $E_{НВМО}$), енергетична щільність молекулярних орбіталей ($\Delta E = E_{ВЗМО} - E_{НВМО}$), абсолютній електронегативності, жорсткість молекули, м'якості та індекса електрофільності та нуклеофільності, що базуються на теорії функціональної щільності. При доборі складових НЕР, порівнюючи досліджувані сполуки, значення $E_{ВЗМО}$ та донорна здатність зменшується у напрямку Ксилітол (9.4573 eV) < Пролін (-9.6873) < Холін хлорид (-9.8745 eV) < Бетаїн (-10.0103eV) < Сечовина (-10.5173eV) < Молочна кислота (-11.4279 eV). За аналізом індексу електрофільності акцепторна здатність сполук при формуванні НЕР наступна: Молочна кислота < Пролін < Холін хлорид < Ксилітол < Бетаїн < Сечовина. Оцінено КХР параметри утворених НЕР. Порядок збільшення електронегативності для НЕР наступний: $-3,99 > -4,24 >$

Квантово-хімічні параметри НЕР

Скорочення	Акцептор водневого зв'язку	Донор водневого зв'язку	$\Delta E = \text{ВЗМО} - \text{НВМО}$	χ , eV	η , eV	σ , eV	ω
НЕР-1	Бетаїн	Сечовина	12,03	-3.99	6.01	0.16	0.998
НЕР-2	Холін Хлорид	Сечовина	10,26	-5.38	5.13	0.19	1.345
НЕР-3	Бетаїн	Молочна кислота	12,36	-5.24	6.18	0.16	1.311
НЕР-4	Пролін	Ксилітол	10,42	-4.24	5.21	0.19	1.061
НЕР-5	Холін Хлорид	Пролін	9,93	-4.71	4.96	0.20	1.179
НЕР-6	Холін хлорид	Ксилітол	9,70	-4.60	4.85	0.20	1.151

Таблиця 5

 σ -профіль для компонентів НЕР

Акцептор водневого зв'язку	σ -профіль	Донор водневого зв'язку	σ -профіль
Бетаїн		Сечовина	
Холін Хлорид		Сечовина	
Бетаїн		Молочна кислота	
Пролін		Ксилітол	
Холін Хлорид		Пролін	
Холін хлорид		Ксилітол	

$-4,60 > -4,71 > -5,24 > -5,38 = \text{НЕР-1} > \text{НЕР-4} > \text{НЕР-6} > \text{НЕР-5} > \text{НЕР-3} > \text{НЕР-2}$. Найвищий індекс електрофільності у НЕР-2 холін хлорид-сечовина (1,34 eV) та НЕР-3 бетаїн-молочна кислота (1.311 eV). Серед розчинників НЕР, НЕР-5 (Холін Хлорид-Пролін) та НЕР-6 (Холін хлорид-

Ксилітол) є найкращим розчинником із найменшою енергетичною щільністю (9,93 та 9,70 eV), найвищим хімічним потенціалом, хімічною м'якістю (0,20 eV) і помірним індексом електрофільності (1.179 та 1.151eV) і відносно меншою електронегативністю ($-0,19$ eV).

Список літератури:

- Achkar El. T., Greige-Gerges H. Fourmentin S. Basics and properties of deep eutectic solvents: a review. *Environ Chem Lett.*, 2021. (19). P. 3397–3408. <https://doi.org/10.1007/s10311-021-01225-8>
- Abbott, A. P., Boothby, D., Capper, G., Davies, D. L., & Rasheed, R. K. Deep eutectic solvents formed between choline chloride and carboxylic acids: versatile alternatives to ionic liquids. *Journal of the American Chemical Society*, 2004. 126(29), 9142-9147.

3. Kalhor P, Ghandi K. Deep Eutectic Solvents as Catalysts for Upgrading Biomass. *Catalysts.*, 2021. 11(2):178. <https://doi.org/10.3390/catal11020178>
4. Vorobyova, V., Skiba, M. & Vasyliiev, G. Extraction of phenolic compounds from tomato pomace using choline chloride-based deep eutectic solvents. *Food Measure.*, 2022. 16, pp. 1087–1104. <https://doi.org/10.1007/s11694-021-01238-5>
5. Vorobyova, V., Skiba, M., Horodniuk, O. et al. Betaine-Based Deep Eutectic Grape Pomace Extract Mediated Synthesis of Silver Nanoparticles with Antibacterial Activities. *BioNanoSci.*, 2023. pp. 1-15. <https://doi.org/10.1007/s12668-023-01211-0>
6. Aldongarov, A., Sailau, Z., Almassov, N., & Toshtay, K. Studying the Formation of Choline Chloride and Glucose Based Natural Deep Eutectic Solvent at the Molecular Level. 2022. pp. 1-8. <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-1198731/v1>
7. Soltanmohammadi, F., Jouyban, A., & Shayanfar, A. New aspects of deep eutectic solvents: extraction, pharmaceutical applications, as catalyst and gas capture. *Chemical Papers*, 2022. 75. pp. 439-453. <http://dx.doi.org/10.1007/s11696-020-01316-w>
8. Zurob, E., Cabezas, R., Villarroel, E., Rosas, N., Merlet, G., Quijada-Maldonado, E., & Plaza, A. Design of natural deep eutectic solvents for the ultrasound-assisted extraction of hydroxytyrosol from olive leaves supported by COSMO-RS. *Separation and Purification Technology*, 2020. 248, 117054. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117054>
9. El-Mansy, M. A. M., El-Nahass, M. M., Khusayfan, N. M., & El-Menyawy, E. M. DFT approach for FT-IR spectra and HOMO–LUMO energy gap for N-(p-dimethylaminobenzylidene)-p-nitroaniline (DBN). *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2013. 111. 217-222. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2013.04.018>
10. F.A. Ashna, A.B. Azeez, M.H. Samir Physical, Thermal and Structural Properties of Choline Chloride: urea Based Ionic Liquids Singap. *J. Sci. Res.*, (2020). 10. pp. 417-424 <https://doi.org/10.1016/j.ceja.2023.100564>
11. Naseem, Z., Shehzad, R. A., Jabeen, S., Tahir, S., Mushtaq, F., Zahid, M., & Iqbal, J. Quantum chemical investigation of choline chloride-based deep eutectic solvents. *Chemical Physics*, 2023. 571. 111936. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2023.111936>
12. Shakourian-Fard, M., Taimoory, S. M., Ghenaatian, H. R., Kamath, G., & Trant, J. F. A DFT study of the adsorption of deep eutectic solvents onto graphene and defective graphene nanoflakes. *Journal of Molecular Liquids*, 2021. 327, 114850. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114850>
13. Ayub, A. R., Yaqoob, U., Rafiq, S., Shehzad, R. A., Ayub, K., Iqbal, J., ... & Elsayed, K. A. A Quantum chemical study of outstanding structural, electronic and nonlinear optical polarizability of boron nitride (B12N12) doped with super salt (P7BaNO3). *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*, 2022. 32(10), 3738-3764. <https://doi.org/10.1007/s10904-022-02371-4>
14. Akman, F. Spectroscopic investigation, HOMO–LUMO energies, natural bond orbital (NBO) analysis and thermodynamic properties of two-armed macroinitiator containing coumarin with DFT quantum chemical calculations. *Canadian Journal of Physics*, 2016. 94(6), 583-593. <https://doi.org/10.1139/cjp-2016-0041>
15. Vorobyova, V. I., Linyucheva, O. V., Chygyrynets, O. E., Skiba, M. I., & Vasyliiev, G. S. Comprehensive physicochemical evaluation of deep eutectic solvents: quantum-chemical calculations and electrochemical stability. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 2023. 750(1), pp. 60-68. <https://doi.org/10.1080/15421406.2022.2073037>

**Vorobiova V.I., Andrukhu Yu.M., Morozova D.O., Ziemtsova V.V., Vasyliiev H.S.,
Skyba M.I., Skyba Yu.M. SELECTION OF COMPONENTS FOR THE SYNTHESIS
OF ENVIRONMENTAL IONIC LIQUIDS OF THE NEW GENERATION
ON THE BASE OF QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS**

In the article, the indices of reactivity in the formation of deep eutectic solvents (DES) are determined on the basis of quantum-chemically determined energy and structural parameters of the molecules of the list of compounds: lactic acid, urea, betaine, choline chloride, xylitol, proline. The density functional theory was used to study the molecular dynamics of DES for the interpretation and justification of the method and quantum-chemical aspects. Comparing the studied compounds, the values of EB3MO and, therefore, the donor capacity decrease in the direction Xylitol (9.4573 eV) < Proline (-9.6873) < Choline chloride (-9.8745 eV) < Betaine (-10.0103 eV) < Urea (-10.5173 eV) < Lactic acid (-11.4279 eV). According to the analysis of the electrophilicity index, the acceptor capacity of compounds during the formation of DES is as follows: Lactic acid < Proline < Choline chloride < Xylitol < Betaine < Urea. The lowest values of molecular orbital gap energy (ΔE) are found in choline chloride (10.123 eV), xylitol (9.733 eV) and proline (10.65 eV). Six NERs were studied: NER-1 Betaine-Urea; DES-2 Choline Chloride-Urea; DES-3 Betaine – Lactic acid;

HER 4 Proline – Xylitol; DES-5 Choline Chloride-Proline; DES-6 Choline chloride-Xylitol. The order of increasing electronegativity for DES is as follows: $-3.99 > -4.24 > -4.60 > -4.71 > -5.24 > -5.38 =$ DES-1 > DES-4 > DES-6 > DES-5 > DES-3 > DES-2. The highest electrophilicity index in DES-2 is choline chloride-urea (1.34 eV) and DES-3 is betaine-lactic acid (1.311 eV). Among DES, DES-5 (Choline Chloride-Proline) and DES-6 (Choline Chloride-Xylitol) are the best solvents with the smallest energy gap (9.93 and 9.70 eV), the highest chemical potential, chemical softness (0.20 eV) and moderate electrophilicity index (1.179 and 1.151 eV) and relatively lower electronegativity (-0.19 eV).

Key words: "green" solvents, low-temperature eutectic solvents, quantum-chemical calculations, indices of reactivity, electronegativity, electrophilicity index, chemical hardness, softness.