

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Аннотация к дипломной работе

«Квантовохимические расчеты энтальпий образования
полиазотистых гетероциклов методом изодесмических
реакций»

Доан Фат Тиен

Руководитель: к.х.н. Матулис Вадим Эдвардович

МИНСК 2014

Дипломная работа включает: 41 страницы, 2 рисунка, 19 таблиц, 33 литературных источника.

Ключевые слова: энтальпия образования, квантовохимический расчет, программный пакет Gaussian, метод изодесмических реакций, термодинамические характеристики, 1,2,4-триазол.

Объектом исследования данной работы являются квантовохимические расчеты. Цель работы – рассчитать энтальпии образования полиазотистых гетероциклов методом изодесмических реакций. Методология исследования: построение изодесмических реакций, определение энтальпий образования полиазотистых гетероциклов с помощью программы Gaussian. Актуальность работы: пятичленные полиазотистые гетероциклы являются эффективными компонентами смесевых топлив, пиротехнических, взрывчатых и газогенерирующих составов, поэтому необходимо рассчитать энтальпии образования этих соединений. Новизна результатов: все полученные в рамках дипломной работы результаты могут быть использованы при разработке методов селективной функционализации триазольного цикла.

Degree work includes: 41 pages, 2 figures, 19 tables, 33 references.

Keywords: formation enthalpy, quantum chemical calculation, software package Gaussian, the isodesmic reactions method, thermodynamic characteristics, 1,2,4-triazole.

Object of study in this work are quantum-chemical calculations. Purpose – to calculate the formation enthalpy of polynitrogen heterocycles by isodesmic reactions method. Methodology of investigation: building of isodesmic reactions, determination of formation enthalpies of polynitrogen heterocycles using the Gaussian. Relevance of the work: five-membered polynitrogen heterocycles are effective components of composite propellants, pyrotechnics, explosives and gas-generating compositions, in this you need to calculate the formation enthalpy of these compounds. The novelty of the results all received under the thesis results can be used in developing methods for the selective functionalization of the triazole ring.