

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Аннотация к дипломной работе

«Квантовохимические расчеты колебательных спектров  
полиазотистых гетероциклов. Отнесение сигналов в спектре.»

Ошкало Игорь Васильевич

Руководитель: к.х.н. Матулис Вадим Эдвардович

МИНСК 2014

Дипломная работа включает: 35 страниц, 16 рисунков, 6 таблиц, 31 литературный источник.

Ключевые слова: колебательный спектр, квантово-химический расчет, программный пакет Gaussian, программный пакет Gamess, отнесение сигналов в ИК-спектре, 1,2,4-триазол, 1,2,3-триазол, 5-хлор-тетразол, 2-метил-4-нитро-1,2,3-триазол.

Объектом исследования данной работы являются триазолы и тетразолы. Цель работы – рассчитать колебательные спектры полиазотистых гетероциклов в программе Gaussian. Рассчитать распределение потенциальной энергии колебаний по естественным координатам в программе Gamess. Методология исследования: расчет ИК-спектров, определение вкладов естественных координат с помощью программы Gamess. Актуальность работы: молекулы исследуемых полиазотистых гетероциклов представляют собой сложные сопряженные системы, поэтому для веществ невозможно сделать правильное отнесение сигналов в ИК-спектрах, основываясь только на концепции характеристических частот, в связи с чем, выполнены квантово-химические расчеты частот и интенсивностей колебаний в ИК-спектрах молекул, для анализа вкладов отдельных фрагментов молекул в энергии колебаний, выполнены расчеты распределения потенциальной энергии колебаний по естественным координатам. Новизна результатов: для серии полиазотистых гетероциклов проведена интерпретация сигналов в ИК-спектрах с помощью расчёта распределения потенциальной энергии колебаний по естественным координатам.

Degree work includes: 35 pages, 16 figures, 6 tables, 31 literary source.

Keywords: vibrational spectrum, quantum-chemical calculation software package Gaussian, a software package Gamess, assignment of signals in the IR spectrum, 1,2,4-triazole, 1,2,3-triazole, 5-chloro-tetrazole, 2 - methyl-4-nitro-1,2,3-triazole.

Object of study in this work are triazoles and tetrazoles. Purpose - to calculate the vibrational spectra polynitrogen heterocycles in the program Gaussian. Calculate the potential energy distribution of fluctuations on natural coordinates in the program Gamess. Research Methodology: Calculation of the IR spectra, the definition of deposits of natural coordinates using the Gamess. Relevance of the work: the molecules studied polynitrogen heterocycles are complex conjugate systems, so it is impossible to make the right assignment of signals in the IR spectra, based solely on the concept of characteristic frequencies, and therefore, performed quantum-chemical calculations of the frequencies and intensities of vibrations in the IR spectra of molecules, to analyze the contributions of individual molecular fragments in the vibrational energy distribution calculated the potential energy fluctuations in the natural coordinates. The novelty of the results: Series polynitrogen heterocycles was interpreted signals in the IR spectra by calculating the potential energy distribution of fluctuations on natural coordinates.

Дыпломная работа ўключае: 35 старонак, 16 малюнкаў, 6 табліц, 31 літаратурную крыніцу.

Ключавыя словы: вагальны спектр, квантава-хімічны разлік, праграмны пакет Gaussian, праграмны пакет Gamess, аднясенне сігналаў ў ВК-дыяпазоне, 1,2,4-трыазол, 1,2,3-трыазол, 5-хлора-тэтразол, 2 - метыл-4-нітра-1,2,3-трыазол.

Аб'ектам даследавання дадзенай работы з'яўляюцца трыазолы і тетразолы. Мэта работы - разлічыць вагальныя спектры поліазоцістых гетэрацыклаў у праграме Gaussian. Разлічыць размеркаванне патэнцыйнай энергіі ваганняў па натуральным каардынатам у праграме Gamess. Метадалогія даследавання: разлік ВК-спектраў, вызначэнне укладаў натуральных каардынатаў з дапамогай праграмы Gamess. Актуальнасць работы: малекулы доследных поліазоцістых гетэрацыклаў ўяўляюць сабой складаныя спалучаныя сістэмы, таму для рэчываў немагчыма зрабіць правільнае аднясенне сігналаў ў ВК-спектрах, грунтуючыся толькі на канцэпцыі характарыстычных частот, у сувязі з чым, выкананы квантава-хімічныя разлікі частаты і інтэнсіўнасці ваганняў ў ВК- спектрах малекул, для аналізу укладаў асобных фрагментаў малекул ў энергіі ваганняў,

выкананы разлікі размеркавання патэнцыйнай энергіі ваганняў па натуральным каардынатам. Навізна вынікаў: для серыі полізоцістых гетэрацыклаў праведзена інтэрпрэтацыя сігналаў ў ВК-спектрах з дапамогай разліку размеркавання патэнцыйнай энергіі ваганняў па натуральным каардынатам.