

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганической химии**

ДЕНИСИК
Михаил Геннадьевич

**Квантовохимические расчеты стандартной
энтальпии образования азолов. Относительная
устойчивость изомеров**

Дипломная работа

Научный руководитель:
к.х.н., доцент кафедры
неорганической химии
Матулис В.Э.

Допущена к защите
«__» _____ 2018 г.
Зав. кафедрой неорганической химии
кандидат химических наук, доцент
Е.И. Василевская

Минск, 2018

РЕФЕРАТ

В дипломной работе содержится 11 рисунков, 11 таблиц, 74 библиографических источников. Количество страниц — 45.

Ключевые слова: АЗОЛ, ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ, КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ, GAUSSIAN 09, ИЗОМЕРИЯ И ТАУТОМЕРИЯ.

Объекты исследования — производные тетразола, 1,2,3-триазола и 1,2,4-триазола.

Цель работы — расчет стандартной энтальпии образования в газовой фазе производных тетразола и триазолов и исследование относительной устойчивости изомеров.

Методы и методология исследований.

При выполнении работы использованы следующие методы расчета: с помощью реакций атомизации и изодесмических реакций. Для квантовохимических расчетов использовались комбинированные методы G3B3 и G4 в пакете Gaussian 09.

Научная новизна.

Современными методами G3B3 и G4 рассчитаны энтальпии образования некоторых производных тетразола и триазолов. Показано, что используемые подходы позволяют с высокой точностью вычислять энтальпии образования азолов. Установлены ошибки, допущенные при экспериментальном определении величин энтальпии образования некоторых производных тетразола, и для этих соединений рекомендованы новые значения.

АНТАЦЫЯ

У працы змяшчаецца 11 малюнкаў, 11 табліц, 56 бібліяграфічных крыніц. Колькасць старонак — 45.

Ключавыя словы: АЗОЛ, ЭНТАЛЬПІЯ АТРЫМАННЯ, КВАНТАВАХІМІЧНЫЯ РАЗЛІКІ, GAUSSIAN 09, ІЗАМЕРЫЯ І ТАУТАМЕРЫЯ.

Аб'екты даследавання — вытворныя тэтразола, 1,2,3-трыазола ды 1,2,4-трыазола.

Мэта працы — разлік стандартнай энтальпіі атрымання ў газавай фазе вытворных тетразола і трыазолаў 09 і даследванне адноснай устойлівасці атрыманых ізамераў.

Метады і метадалогія даследаванняў.

Пры выкананні працы выкарыстаны наступныя метады разліку: з дапамогай рэакцый атамізацыі і ізадэсмічных рэакцый. Для квантавахімічных

разлікаў выкарыстоўваліся камбінаваныя метады G3B3 і G4 ў праграме Gaussian 09.

Навуковая навізна.

Сучаснымі метадамі разлічаны энталыіі атрымання некаторых вытворных тэтразола і трыазолаў. Паказана, што выкарыстоўваюцца падыходы, якія дазваляюць з высокай дакладнасцю вылічаць энталыіі атрымання азолаў. Устаноўлены памылкі, дапушчаныя пры эксперыментальным вызначэнні энталыіі атрымання некаторых вытворных тэтразола, і для гэтых злучэнняў прапанаваны новыя значэння.

ABSTRACT

The work contains 11 figures, 11 tables, 74 bibliographic sources. The number of pages is 45.

Keywords: AZOLE, ENTHALPY OF FOMATION, QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONS, GAUSSIAN 09, ISOMERISM AND TAUTOMERISM.

The objects of investigation are tetrazole, 1,2,3-triazole and 1,2,4-triazole derivatives.

The aim of this work is to calculate the standard enthalpy of formation in the gaseous phase of tetrazole and triazole derivatives and to study the relative stability of isomers.

Methods and methodology of research.

When performing the work, the following calculation methods were used: atomization reactions and isodesmic reactions. For the quantum chemical calculations, the combined methods G3B3 and G4 were used in the Gaussian 09 package.

Scientific novelty.

Modern methods G3B3 and G4 were used to calculate the enthalpy of the formation of certain tetrazole and triazole derivatives. It is shown that the approaches used make it possible to calculate the enthalpies of the formation of azoles with high accuracy. Errors in the experimental determination of the enthalpy of formation of some tetrazole derivatives have been established, and new values have been recommended for these compounds.