

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ
БЕЛАРУСЬ**

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганической химии**

ДРОЗДОВА
Виктория Анатольевна

**Исследование процесса гидролиза комплекса хлорида платины(II) с 2-
алкилтетразол-5-илуксусной кислотой методами квантовой химии**

Дипломная работа

Научный руководитель:
доцент кафедры неорганической
химии, кандидат химических
наук

В. Э. Матулис

Допущена к защите
«___»_____2019

Зав. кафедрой неорганической химии
кандидат химических наук, доцент

_____Е.И. Василевская

Минск, 2019

РЕФЕРАТ

Дроздова Виктория Анатольевна

Дипломная работа, 44 с., 17 рис., 19 табл., 27 источников.

Исследование процесса гидролиза комплекса хлорида платины(II) с 2-алкилтетразол-5-илуксусной кислотой методами квантовой химии

Ключевые слова: ЯДЕРНО МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС, DFT, ТЕОРИЯ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ, ЯМР СПЕКТРЫ, ГИДРОЛИЗ, SCRF, WC04, WP04

Объект исследования – комплекс хлорида платины(II) с 2-алкилтетразол-5-илуксусной кислотой.

Цель работы – изучение комплексов хлорида платины (II) с 2-метилтетразол-5-илуксусной кислотой и 2-изопропилтетразол-5-илуксусной кислотой, их геометрических, энергетических характеристик и спектров ЯМР, а также продуктов частичного гидролиза этих комплексов и объяснение закономерностей в изменении ЯМР-спектров в ходе гидролиза.

Метод исследования – теория функционала плотности.

В **теоретической части** работы проведён аналитический обзор научной литературы, соответствующей теме дипломной работы. Изучены работы по исследованию ЯМР спектров, теория функционала плотности DFT, некоторые базисные наборы, а также методы учета влияния растворителя при квантово-химических расчетах.

Практическая часть представляет собой описание и анализ результатов теоретических расчетов геометрических характеристики и характеристик ЯМР-спектров комплексов хлорида платины(II) с 2-алкилтетразол-5-илуксусной кислотой.

Полученные результаты – Предложен уровень теории, позволяющий воспроизводить геометрические, энергетические характеристики и характеристики ЯМР-спектров для комплексов хлорида платины(II) с 2-алкилтетразол-5-илуксусными кислотами с высокой точностью. Исследован процесс гидролиза и, с позиции теории молекулярной симметрии, объяснено изменение ЯМР-спектров исследуемых комплексов в ходе процесса гидролиза, а именно: расщепление сигналов метильных групп при превращении в моноаквакомплекс.

РЭФЕРАТ

Драздова Вікторыя Анатольеўна

Дыпломная праца, 44 с., 17 мал., 19 табл., 27 крыніц.

Даследаванне працэсу гідроліза комплексу хларыду плаціны (II) з 2-алкілтетразол-5-ілукусуснай кіслатой метадамі квантавай хіміі

Ключавыя словы: ЯДЗЕРНА МАГНІТНЫ РЭЗАНАНС, DFT, ТЭОРЫЯ ФУНКЦЫЯНАЛУ ШЧЫЛЬНАСЦІ, ЯМР СПЕКТР, ГІДРОЛІЗ, SCRF, WC04, WP04.

Аб'ект даследавання – комплекс хларыду плаціны (II) з 2-алкілтетразол-5-ілукусуснай кіслатой.

Мэта працы – даследаваць комплексаў хларыду плаціны (II) з 2-мецілтетразол-5-ілукусуснай кіслатой і 2-ізопропілтетразол-5-ілукусуснай кіслатой, іх геаметрычных, энергетычных характарыстык і спектраў ЯМР, а таксама прадуктаў частковага гідролізу гэтых комплексаў і тлумачэнне заканамернасцей у змяненні ЯМР-спектраў падчас гідролізу.

Метад даследавання – тэорыя функцыяналу шчыльнасці.

У тэарэтычнай частцы работы праведзены аналітычны агляд навуковай літаратуры, якая адпавядае тэме дыпломнай працы. Вывучаны работы па даследаванні ЯМР спектраў, тэорыя функцыяналу шчыльнасці DFT, некаторыя базісныя наборы, а таксама метады ўліку ўплыву растваральніка пры квантава-хімічных разліках.

Практычная частка ўяўляе сабой апісанне і аналіз вынікаў, тэарэтычных разлікаў геаметрычных характарыстык і характарыстык ЯМР спектраў атрыманых пры правядзенні аптымізацыі комплексаў хларыду плаціны (II) з 2-алкілтетразол-5-ілукусуснай кіслатой.

Атрыманыя вынікі– Прапанаваны ўзровень тэорыі, які дазваляе ўзнаўляць геаметрычныя, энергетычныя характарыстыкі і характарыстыкі ЯМР-спектраў для комплексаў хларыду плаціны (II) з 2-алкілтетразол-5-ілукусуснымі кіслотамі з высокай дакладнасцю. Таксама быў даследаваны працэс гідролізу і, з пазіцыі тэорыі малекулярнай сіметрыі, растлумачана змена ЯМР-спектраў доследных комплексаў у ходзе працэсу гідролізу, а менавіта: расшчапленне сігналаў метільных груп пры ператварэнні ў моноаквакомплекс..

ABSTRACT

Drozdova Victoria Anatolyevna

Graduate work, 44 pp., 17 fig., 19 tables, 27 ref.

Investigation of the process of hydrolysis of platinum (II) chloride complex with 2-alkyltetrazol-5-yl-acetic acid using quantum chemistry methods

Keywords: NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE, DFT, DENSITY FUNCTIONAL THEORY, NMR SPECTRA, HYDROLYSIS, SCRF, WC04, WP04

The object of research complex of platinum (II) chloride with 2-alkyltetrazol-5-yl-acetic acid.

Purpose of the work: is to study chloride complexes of platinum (II) with 2-methyltetrazol-5-ylacetic acid and 2-izopropiltetrazol-5-ylacetic acid, their geometric, energy characteristics and NMR spectra, and the products of partial hydrolysis of these complexes and explanation of patterns in the changes NMR spectra during hydrolysis

Method of investigation: density functional theory.

In **the theoretical part** of the work carried out an analytical review of the scientific literature, the relevant topic of the thesis. Studies of the NMR spectra, the DFT density functional theory, some basic sets, and methods for taking into account the influence of the solvent in quantum chemical calculations were studied.

The **practical part** is a description and analysis of the results obtained during the theoretical calculations of the geometric characteristics and characteristics of the NMR spectra of complexes of platinum (II) chloride with 2-alkyl tetrazole-5-yl-acetic acid.

The obtained results: There was proposed a theory level that allows reproducing geometric, energy characteristics and NMR spectra for platinum (II) chloride complexes with 2-alkyl tetrazol-5-yl-acetic acids with high accuracy. The process of hydrolysis was investigated and, from the standpoint of the molecular symmetry theory, the change in the NMR spectra for the complexes under study during the process of hydrolysis was explained, namely: the splitting of the methyl groups signals during the conversion into a monoaccomplex.