

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ

**Учреждение образования
«Международный государственный экологический институт имени А.Д.
Сахарова»**

**Белорусского государственного университета
Кафедра экологической химии и биохимии**

**КОНИИН, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ЕГО
ПРИМЕНЕНИЕ В ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ**

Дипломная работа студентки V курса

ЛУКШИ Екатерины Сергеевны

_____ Е.С. Лукша

«Допустить к защите»
Зав. кафедрой
экологической
химии и биохимии
канд. хим. наук, доцент,
профессор РАЕ
_____ С. Н. Шахаб

Научный руководитель
Зав. кафедрой экологической
химии и биохимии
канд. хим. наук, доцент,
профессор РАЕ

_____ С. Н. Шахаб

« _____ »
2020г.

Минск, 2020

Реферат

Дипломная работа: Кониин, физико-химические свойства и его применение в экологической промышленности: 46 страниц, 7 рисунков, 6 таблиц, 11 источников.

Ключевые слова: кониин, алкалоиды, метод функционала плотности, монооксид углерода, физическая сорбция.

Методы исследования: полуэмпирический (PM6) и неэмпирический методы (M062X) квантовой химии.

Цель работы: изучение физико-химических свойств кониина и его применение в экологической промышленности.

Полученные результаты и их новизна: Впервые найдены геометрические параметры молекулы кониина, рассчитан электронный и УФ-спектр кониина неэмпирическим методом (M062X). Установлено межмолекулярное взаимодействие между молекулами кониина и СО воздуха. Установлено, что кониин является мощным поглотителем СО воздуха.

Степень использования: результаты работы могут быть использованы в области здравоохранения, химии окружающей среды.

Область применения: химия, молекулярная биология, экологическая промышленность.

Рэферат

Курсовая работа: Коніін, фізіка-хімічныя ўласцівасці і яго прымяненне ў экалагічнай прамысловасці: 46 старонак, 7 малюнкаў, 6 табліц, 11 крыніц.

Ключавыя словы: коніін, алкалоіды, метады функцыяналу шчыльнасці, монааксід вугляроду, фізічная сорбцыя.

Метады даследавання: полуэмпірычэскі (PM6) і неэмпірычэскі метады (M062X) квантавай хіміі.

Мэта працы: вывучэнне фізіка-хімічных уласцівасцяў конііна і яго прымяненне ў экалагічнай прамысловасці.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: Упершыню разлічаны геаметрычныя параметры малекулы конііна, разлічаны электронны і УФ-спектр конііна неэмпірычэскім метадам (M062X). Устаноўлена міжмалекулярнае ўзаемадзеянне паміж малекуламі конііна і CO паветра. Знойдзена, што коніін з'яўляецца магутным паглынальнікаў CO паветра.

Ступень выкарыстання: вынікі працы могуць быць выкарыстаны ў галіне аховы здароўя, хімія навакольнага асяроддзя.

Вобласць ужывання: хімія, малекулярная біялогія, экалагічная прамысловасць.

Abstract

Course work: Koniin, physicochemical properties and its application in the ecological industry: 46 pages, 7 figures, 6 tables, 11 sources.

Key words: coniin, alkaloids, density functional method, carbon monoxide, physical sorption.

Research methods: semi-empirical (PM6) and non-empirical methods (M062X) of quantum chemistry.

Objective: to study the physicochemical properties of horse and its use in the environmental industry.

The obtained results and their novelty: For the first time, geometric parameters of the coniin molecule were found, and the electron and UV spectrum of coniin was calculated using a nonempirical method (M062X). The intermolecular interaction between coniin and CO air molecules was established. It has been established that coniine is a powerful air CO absorber.

The degree of use: the results can be used in the field of health, environmental chemistry.

Scope: biochemistry, molecular biology, environmental industry.