

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра физической химии

ЮРКШТОВИЧ Яна Николаевна

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕЗОИОННЫХ
ПРОИЗВОДНЫХ 5-ИМИНОТЕТРАЗОЛА**

Магистерская диссертация
специальность 1-31 80 06 «Химия»

Научный руководитель
Блохин Андрей Викторович,
доктор химических наук,
профессор

Допущена к защите
«__» _____ 2021 г.
Зав. кафедрой физической химии
_____ А.В. Блохин
доктор химических наук, профессор

Минск, 2021

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Магистерская диссертация в объеме 89 страниц содержит 8 рисунков, 11 таблиц, 5 приложений и 86 источников.

Ключевые слова: ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА, СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА, КВАНТОВАЯ ХИМИЯ, МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА, АВТОМАТИЗАЦИЯ РАСЧЕТНЫХ ПРОЦЕДУР.

Объект исследования – мезоионные соединения 1,3-ди(*трет*-бутил)-5-иминотетразол и 1-метил-3-(*трет*-бутил)-5-иминотетразол.

Предмет исследования – термодинамические свойства данных веществ.

Цель и задачи исследования. Цель настоящей магистерской диссертации состоит в теоретическом расчете термодинамических свойств 1,3-ди(*трет*-бутил)-5-иминотетразола и 1-метил-3-(*трет*-бутил)-5-иминотетразола, а также в автоматизации некоторых расчетных процедур с целью исключения грубых ошибок, сопряженных с человеческим фактором. Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

- С использованием методов статистической термодинамики были рассчитаны стандартные термодинамические функции (энтропия, теплоемкость, приведенная энтальпия и приведенная энергия Гиббса) веществ в состоянии идеального газа в температурном интервале (0 – 1000) К.

- По методу изодесмических реакций были рассчитаны стандартные газофазные энтальпии образования 1,3-ди(*трет*-бутил)-5-иминотетразола и 1-метил-3-(*трет*-бутил)-5-иминотетразола при $T = 298.15$ К.

- Была решена задача о поиске оптимального признакового пространства и параметризации модели электростатического потенциала для соединений структурно схожих с тетразолами. Была обоснована целесообразность использования полученной модели для расчета стандартных энтальпий сублимации 1,3-ди(*трет*-бутил)-5-иминотетразола и 1-метил-3-(*трет*-бутил)-5-иминотетразола при $T = 298.15$ К.

- С использованием возможностей языка программирования Python были автоматизированы процессы расчета приведенных моментов инерции симметрических волчков в молекулах органических соединений; расчета газофазных энтальпий образования веществ по методу изо- или гомодесмических реакций; оптимизации и параметризации модели электростатического потенциала.

Результаты настоящей работы могут найти применение при решении задач оптимизации производства 1,3-ди(*трет*-бутил)-5-иминотетразола и 1-метил-3-(*трет*-бутил)-5-иминотетразола; для подтверждения качества экспериментально полученных значений энтальпий образования кристаллических производных тетразола; для поиска соединений, обладающих искомыми детонационными свойствами.

АГУЛЬНАЯ ХАРАКТЕРЫСТЫКА РАБОТЫ

Магістарская дысертацыя ў аб'ёме 89 старонак змяшчае 8 малюнкаў, 11 табліц, 5 дадаткаў і 86 крыніц.

Ключавыя словы: ХІМІЧНАЯ ТЭРМАДЫНАМІКА, СТАТЫСТЫЧНАЯ ТЭРМАДЫНАМІКА, КВАНТАВАЯ ХІМІЯ, МАДЭЛЬ ЭЛЕКТРАСТАТЫЧНАГА ПАТЭНЦЫЯЛУ, АЎТАМАТЫЗАЦЫЯ РАЗЛІКОВЫХ ПРАЦЭДУР.

Аб'ект даследвання – мезаіённыя злучэння 1,3-ды(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразол і 1-метыл-3-(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразол.

Прадмет даследвання – тэрмадынамічныя ўласцівасці дадзеных рэчываў.

Мэта і задачы даследвання. Мэта дадзена магістэрская дысертацыя складаецца ў тэрэтычным разліку тэрмадынамічных уласцівасцяў 1,3-ды(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразолу і 1-метыл-3-(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразолу, а таксама ў аўтаматызацыі некаторых разліковых працэдур з мэтай выключэння грубых памылак, звязаных з чалавечым фактарам. Для дасягнення пастаўленай мэты былі вырашаныя наступныя задачы:

- З выкарыстаннем метадаў статыстычнай тэрмадынамікі былі разлічаны стандартныя тэрмадынамічныя функцыі (энтрапія, цеплаёмістасць, прыведзеная энтальпія і прыведзеная энергія Гібса) рэчываў у стане ідэальнага газу ў тэмпературным інтэрвале (0 – 1000) К.

- З выкарыстаннем метаду ізадэсмічных рэакцый былі разлічаны стандартныя газафазныя энтальпіі ўтварэння 1,3-ды(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразолу і 1-метыл-3-(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразолу пры $T = 298.15$ К.

- Была вырашана задача аб пошуку аптымальнай прыкметнай прасторы і параметрызацыі мадэлі электрастатычнага патэнцыялу для злучэнняў структурна падобных да тэтразолаў. Была абгрунтавана мэтазгоднасць выкарыстання атрыманай мадэлі для разліку стандартных энтальпій сублімацыі 1,3-ды(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразолу і 1-метыл-3-(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразолу пры $T = 298.15$ К.

- З выкарыстаннем магчымасцяў мовы рпаграмавання Python былі аўтаматызаваны працэсы разліку прыведзеных момантаў інерцыі сіметрычных туркоў у малекулах арганічных злучэнняў; разліку газафазных энтальпій утварэння рэчываў па метадзе іза- або гомадэсмічных рэакцый; птымізацыі і параметрызацыі мадэлі электрастатычнага патэнцыялу.

Вынікі дадзенай работы могуць знайсці прымяненне пры вырашэнні задач аптымізацыі вытворчасці 1,3-ды(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразолу і 1-метыл-3-(*трэт*-бутыл)-5-імінатэтразолу; для пацверджання якасці эксперыментальна атрыманых значэнняў энтальпій утварэння крышталічных вытворных тэтразолу; для пошуку злучэнняў, якія маюць патрэбныя дэтанацыйныя ўласцівасці.

GENERAL CHARACTERISTIC OF WORK

Master's thesis consists of 89 pages and contains 8 figures, 11 tables, 5 appendices and 86 sources.

Key words: CHEMICAL THERMODYNAMICS, STATISTICAL THERMODYNAMICS, QUANTUM CHEMISTRY, ELECTROSTATIC POTENTIAL MODEL, CALCULATION PROCEDURES AUTOMATIZATION.

Object of the study – mesoionic compounds 1,3-di-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide and 1-methyl-3-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide.

Subject of the study –thermodynamic properties of the mentioned compounds.

Purpose and objectives of study. The purpose of the relevant study is to calculate theoretically thermodynamic properties of the 1,3-di-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide and 1-methyl-3-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide, and to introduce automation of some calculation procedures in order to exclude gross errors associated with the human factor. To achieve this goal, the following tasks were solved:

- The standard thermodynamical properties (entropy, heat capacity, reduced enthalpy and reduced Gibbs energy) of the substances in the ideal gas state were calculated using the statistical thermodynamics in the temperature range of (0 – 1000) K.

- The standard heats of formation of the 1,3-di-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide and 1-methyl-3-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide in the gaseous state at $T = 298.15$ K were calculated in the framework of the isodesmic reactions approach.

- Optimal feature space search and parametrization of the electrostatic potential model were done for the dataset of the substances structurally similar with tetrazoles. The expediency of using the obtained model for calculating the standard enthalpies of sublimation of 1,3-di-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide and 1-methyl-3-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide at $T = 298.15$ K was justified.

- The Python language was used to automatize some calculation procedures, such as calculation of the reduced inertia moments of the symmetrical tops in organic molecules; calculation of the gas phase heats of formation of the substances in the framework of the isodesmic or isogyric reactions approach; optimization and parametrization of the electrostatic potential model.

The results obtained in this work can be

The results of this work can find application in solving problems of optimizing the production of 1,3-di-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide and 1-methyl-3-*tert*-butyltetrazolium-5-aminide; in confirming the quality of the experimentally obtained values of the enthalpies of formation of crystalline tetrazole derivatives; in screening procedures for compounds with the desired detonation properties.