

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

Кафедра неорганической химии

ГЕЛИНА

Влада Николаевна

Квантовохимические расчеты СН-кислотности ароматических карбо- и гетероциклических соединений. Проблема учета влияния растворителя

Дипломная работа

Научный руководитель:

к. х. н., доцент Матулис В. Э.

Рецензент:

д.х.н., профессор Свиридова Т. В

Допущена к защите

«___» _____ 2023 г.

Зав. кафедрой неорганической химии,

доктор химических наук, профессор Д. В. Свиридов

Минск, 2023

РЕФЕРАТ

Дипломная работа: 44 страницы, 11 рисунков, 5 таблиц, 74 литературных источника.

ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ, СН-КИСЛОТНОСТЬ, ГАЗОФАЗНАЯ КИСЛОТНОСТЬ, КОНСТАНТА КИСЛОТНОСТИ, ДМСО, ТГФ, КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ, DFT, МОДЕЛИ РАСТВОРИТЕЛЕЙ, SMD, РСМ.

Цель: разработка оптимального метода расчета констант кислотности гетероциклических ароматических соединений.

Методы исследования: квантовохимические расчеты в газовой фазе выполнялись с использованием композитного метода G3B3, энергия сольватации вычислялась с использованием неявных моделей растворителей РСМ, SMD, РСМG03.

В рамках работы был проведен сравнительный анализ результата расчета констант кислотности в растворе ТГФ и ДМСО с использованием различных моделей растворителей. Было установлено, что результаты, полученные при использовании модели SMD хорошо согласуются с соответствующими экспериментальными данными.

РЭФЕРАТ

Дыпломная работа: 44 старонкі, 11 малюнкаў, 5 табліц, 74 літаратурныя крыніцы.

ГЕТАРАЦЫКЛІЧНЫЯ ЗЛУЧЭННІ, СН-КІСЛОТНАСЦЬ, ГАЗАФАЗНАЯ КІСЛОТНАСЦЬ, КАНСТАНТА КІСЛОТНАСЦІ, ДМСО, ТГФ, КВАНТАХІМІЧНЫМІ РАЗЛІКІ, DFT, МАДЭЛІ РАСТВАРАЛЬНІКАЎ, РСМ, SMD, РСМG03.

Мэта: распрацоўка аптымальнага метаду разліку канстант кіслотнасці гетэрацыклічных араматычных злучэнняў.

Метады даследавання: квантавахімічныя разлікі ў газавай фазе выконваліся з выкарыстаннем кампазітнага метаду G3B3, энергія сальватацыі вылічалася з выкарыстаннем няяўных мадэляў растваральнікаў РСМ, SMD, РСМG03.

У рамках працы быў праведзены параўнальны аналіз выніку разліку канстант кіслотнасці ў раствору ТГФ і ДМСО з выкарыстаннем розных мадэляў растваральнікаў. Было ўстаноўлена, што вынікі, атрыманыя пры выкарыстанні мадэлі SMD добра стасуюцца з адпаведнымі эксперыментальнымі дадзенымі.

ABSTRACT

Thesis: 44 pages, 11 figures, 5 tables, 74 references.

HETEROCYCLIC COMPOUNDS, CH-ACIDITY, GAS-PHASE ACIDITY, ACIDITY CONSTANT, DMSO, THF, QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONS, DFT, SOLVENT MODELS, SMD, PCM.

Purpose: development of an optimal method for calculating the acidity constants of heterocyclic aromatic compounds.

Research methods: quantum chemical calculations in the gas phase were performed using the G3B3 composite method, solvation energy were calculated using implicit solvent models PCM, SMD, PCMG03.

In this work, a comparative analysis of the result of calculating the acidity constants in a solution of THF and DMSO was carried out using various models of solvents. It was found that the results obtained using the SMD model are in good agreement with the corresponding experimental data.