

Использование методов компьютерной химии для оценки энтальпий образования и энергии диссоциации связи С–Н в ряду ароматических нитросоединений

© Егоров Даниил Леонидович

Кафедра интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами.
Казанский национальный исследовательский технологический университет.
ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: +7 (843) 231-42-53. E-mail: egorovdl2015@yandex.ru

Ключевые слова: квантово-химический расчет, ароматические нитросоединения, энтальпия образования, энергия диссоциации, Gaussian.

Аннотация

С использованием квантово-химических методов функционала плотности B3LYP/6-31G(d,p), B3LYP/6-31+G(2df,p), wB97x/def2tzvpp, проведен расчет молекул бензола, нитробензола, хлорнитробензола, а также фенильного, нитрофенильных и хлорнитрофенильных радикалов. Расчет проводился с помощью программного пакета Gaussian. По полученным данным были вычислены энтальпии образования исследуемых соединений, для чего использовалась разработанная автором программа CalcTDFunc. Также были вычислены энергии диссоциации связи С–Н в бензоле, нитробензоле и хлорнитробензоле. Рассматривался отрыв водорода в различных положениях относительно нитрогруппы. Для энтальпий образования бензола, нитробензола, а также для фенильного и нитрофенильных радикалов наиболее надежными можно считать оценки методов B3LYP/6-31G(d,p) и wB97x/def2tzvpp: значения, предсказанные ими, достаточно близки между собой, а также хорошо согласуются с экспериментальными данными для тех соединений, для которых эти данные имеются. Значения, предсказанные методом B3LYP/6-31+G(2df,p), существенно завышены. При замене в соединении одного атома водорода на атом хлора результаты всех трех методов дают слишком большой разброс значений, что затрудняет исследование изменения энтальпий образования. Однако значения энергий диссоциации все три метода передают достаточно близко. Показано, что данный факт можно объяснить согласованностью изменения значений энтальпий образования исходных соединений и энтальпий образования радикалов, причем высокий коэффициент корреляции наблюдается для всех трех методов. Рассмотрено влияние хлора и нитрогруппы на прочность связи С–Н. Отмечено, что положение отрываемого водорода в нитробензоле и присутствие хлора не оказывает на ее величину значительного влияния.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Егоров Д.Л. Использование методов компьютерной химии для оценки энтальпий образования и энергии диссоциации связи С–Н в ряду ароматических нитросоединений. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.79. №9. С.11-17. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-11

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Егоров Д.Л. Использование методов компьютерной химии для оценки энтальпий образования и энергии диссоциации связи С–Н в ряду ароматических нитросоединений. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.8. №3. Id.15. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-11/ROI-jbc-RA/24-8-3-15

The output for citing the English online version of the article:

Daniil L. Egorov. Using computational chemistry methods to estimate the enthalpies of formation and dissociation energy of the C–H bond in a series of aromatic nitro compounds. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.8. No.3. Id.15. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-11/ROI-jbc-A/24-8-3-15