

---

## РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ АЗОЛОВ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИМИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

**Зауэр Е.А.**

Волгоградский государственный технический университет,  
г. Волгоград

**Зауэр Е.А.**  
Волгоградский  
государственный  
технический университет

Квантово-химические методы расчета широко используются для определения энтальпий образования соединений разных классов. Они особенно удобны для расчетов больших молекул.

В данной работе с помощью полуэмпирических квантово-химических методов выполнен расчет энтальпий образования пятичленных азотсодержащих гетероциклов в газовой фазе.

Для выбора метода квантово-химического расчета было выбрано около шестидесяти соединений данного класса с известными экспериментальные значения энтальпий образования в газовой фазе и с помощью программы MOPAC, в которую входят методы PM3, MINDO, AM1 и MNDO, были выполнены полная оптимизация их геометрии и рассчитаны энтальпии образования.

Анализ полученных результатов показал, что наилучшая корреляционная связь между экспериментальными и расчетными значениями энтальпий образования имеет место при использовании метода PM3. Зависимость носит линейный характер и может быть использована для прогнозирования энтальпий образования пятичленных азотсодержащих гетероциклов в газовой фазе, экспериментальные значения для которых неизвестны.