**Энтальпии образования бромсодержащих антипиренов на основе композиционного квантово-химического подхода и метода модельных реакций**

***Розов Т.П.1,2, Отлётов А.А.1, Миненков Ю.В.1***

*Студент, 5 курс специалитета*

*1Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН,*
*Москва, Россия*

*2Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: tipo3ro@gmail.com*

Бромсодержащие антипирены представляют собой класс соединений, добавляемых к различным материалам с целью подавления их горения. Для моделирования процессов с участием этих соединений необходимо знать их термодинамические характеристики, в частности, энтальпии образования (ΔfH0). Прямое экспериментальное определение этих характеристик затруднено в связи со сложностью получения чистых соединений и их склонностью к фотохимическому разложению. Поэтому важной альтернативой для получения термодинамических данных становятся квантово-химические расчеты.

В данной работе были предсказаны энтальпии образования в газовой фазе для 12 ароматических бромсодержащих антипиренов реалистичного размера (до 30 тяжелых атомов), используемых в промышленности. С помощью разработанного в нашей группе программного обеспечения[1,2] для каждого антипирена был составлен набор модельных реакций, включающих помимо него «опорные» соединения с надежно определенными ΔfH0. Высокоточные энтальпии модельных реакций ΔrH0 были получены в рамках композиционного подхода Феллера-Петерсона-Диксона,[3] основанного на локальном варианте метода связанных кластеров DLPNO-CCSD(T). Комбинация ΔrH0 с ΔfH0 опорных соединений по закону Гесса позволила определить энтальпию образования антипирена из конкретной модельной реакции.

Из-за несовершенства квантово-химических методов и возможных неточностей в ΔfH0 опорных соединений, предсказанная ΔfH0 антипирена зависит от выбора модельной реакции. Для устранения предвзятости в выборе реакции предсказанная ΔfH0 усреднялась по всем модельным реакциям. Для повышения надежности такого усреднения каждой модельной реакции присваивался определенный вес на основе следующих критериев: 1) стехиометрия реакции, 2) погрешности в ΔfH0 опорных соединений, 3) изменение энергии корреляции (разность DLPNO-CCSD(T) и HF энергий реакции, экстраполированных на предел бесконечного базисного набора (CBS)).

Полученные значения были сопоставлены с известными из литературы теоретическими и экспериментальными величинами. Также было выполнено сравнение с энтальпиями образования этих соединений, полученных в рамках аддитивно-групповых и полуэмпирических методов. Предварительные результаты показывают ненадежность рассмотренных приближенных подходов.

*Авторы благодарят Российский Научный Фонд за финансовую поддержку*

*(проект РНФ 24-23-00302)*

**Литература**

1. Minenkova I., Otlyotov A.A., Cavallo L., Minenkov Y. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2022. Vol. 24. N. 5. P. 3163–3181.

2. Nosach E.A., Rozov T.P., Otlyotov A.A., Minenkov Y. // Adv. Theory Simulations. 2024. Vol. 7. P. 2400319.

3. D. A. Dixon, D. Feller and K. A. Peterson // Annual Reports in Computational Chemistry, ed. A. W. Ralph, Elsevier. 2012. Vol. 1. Chapt. 8. P 1-28.