

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
АРХИТЕКТУРНО-СТРОИТЕЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Себряковский филиал

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
СОЦИАЛЬНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ

ИНСТИТУТ БИОХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ РАН

Квантово-химический расчет стирола и его производных методом АВ INITIO

Монография

*Под общей редакцией
доктора химических наук, профессора В. А. Бабкина*

Волгоград 2013

УДК 577.175

ББК 24.13

К32

Авторский коллектив:

доктор химических наук, профессор, академик Международной академии «Контенант», заведующий лабораторией «Компьютерное моделирование молекулярных систем» СФ ВолгГАСУ **В. А. Бабкин**; аспирант ВолгГАСУ **Д. С. Андреев**; доцент СФ ВолгГАСУ **С. Е. Карпушова**; студентка ВГСПУ **Е. Г. Савина**; кандидат химических наук, доцент ВГСПУ **Г. А. Савин**; доктор химических наук, профессор, член-корреспондент АН РБ **Ю. А. Сангалов** (Институт нефтепереработки, г. Уфа); академик Американского химического общества, член Королевского химического общества (Великобритания), академик Международной академии творчества (Москва – Сан-Диего, Россия – США), академик Международной академии наук (Мюнхен, Германия), заслуженный деятель науки РФ, доктор химических наук, профессор **Г. Е. Заиков** (ИБХФ РАН, г. Москва)

Рецензенты:

доктор химических наук, профессор, член-корреспондент
Российской инженерной академии наук, заслуженный работник высшей школы РФ
В. Т. Фомичев (ВолгГАСУ);
кандидат физико-математических наук **Р. Г. Федун** (ВолГУ)

ISBN 978-5-9669-1195-9



- © Бабкин В.А., Андреев Д.С., Карпушова С.Е.,
Савина Е.Г., Савин Г.А., Сангалов Ю.А.,
Заиков Г.Е., 2013
- © ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный
архитектурно-строительный университет».
Себряковский филиал, 2013
- © ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный
социально-педагогический университет», 2013
- © Институт нефтепереработки, 2013
- © Институт биохимической физики РАН, 2013

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
Глава 1. Квантово-химический расчет стирола и его производных методом AB INITIO	6
Заключение	80
Список литературы	81

А

Квантово-химический расчет стирола и его производных методом
К32 АВ INITIO [Текст] : монография / В. А. Бабкин, Д. С. Андреев,
С. Е. Карпушова, Е. Г. Савина, Г. А. Савин, Ю. А. Сангалов, Г. Е. Заиков ;
под общ. ред. проф. В. А. Бабкина ; Федер. гос. бюджет. образоват.
учреждение высш. проф. образования «Волгогр. гос. архит.-строит. ун-т».
Себряк. фил., Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. проф.
образования «Волгогр. гос. соц.-пед. ун-т», Ин-т нефтепереработки, Ин-т
биохим. физики РАН. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2013. – 108 с.

ISBN 978-5-9669-1195-9

В монографии представлены результаты квантово-химических расчетов стирола и его производных мономеров катионной полимеризации (геометрическое и электронное строение, общие и электронные энергии, распределение зарядов на атомах и т.п.). Кроме того, теоретически оценена кислотная сила этих мономеров.

Монография предназначена для бакалавров, магистров, научных работников, соискателей, аспирантов и докторантов, работающих в области химии полимеров.

УДК 24.13
ББК 577.175

Научное издание

Авторский коллектив:

Бабкин Владимир Александрович, **Андреев** Дмитрий Сергеевич,
Карпушова Светлана Евгеньевна и др.

Квантово-химический расчет стирола и его производных методом АВ INITIO

Монография

Под общей редакцией проф. В.А. Бабкина

Главный редактор *А.В. Шестакова*
Техническое редактирование *Е.С. Страховой*
Оформление обложки *Н.Н. Захаровой*

Печатается в авторской редакции.

Подписано в печать 09.08 2013 г. Формат 60х84/16
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Усл.-печ. л. 6,3.
Уч.-изд. л. 6,8. Тираж 50 экз. Заказ «С» 92.

Издательство Волгоградского государственного университета.
400062, г. Волгоград, просп. Университетский, 100.
E-mail: izvolgu@volsu.ru