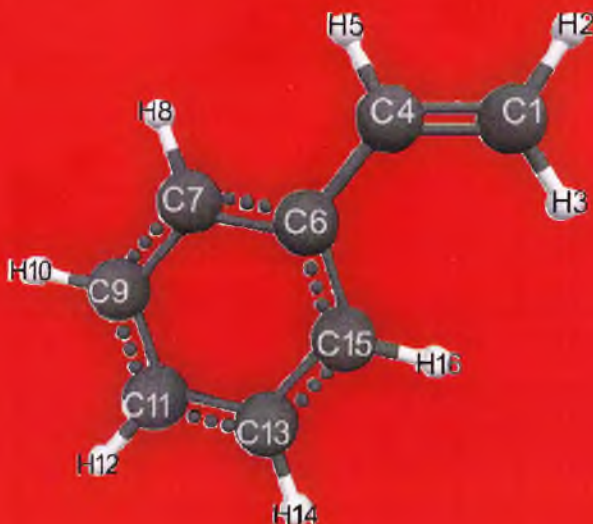


В.А. Бабкин
Д.С. Андреев
С.Е. Карпушова
Е.Г. Савина
Г.А. Савин
Ю.А. Сангалов
Г.Е. Заиков

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СТИРОЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ МЕТОДОМ AB INITIO



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