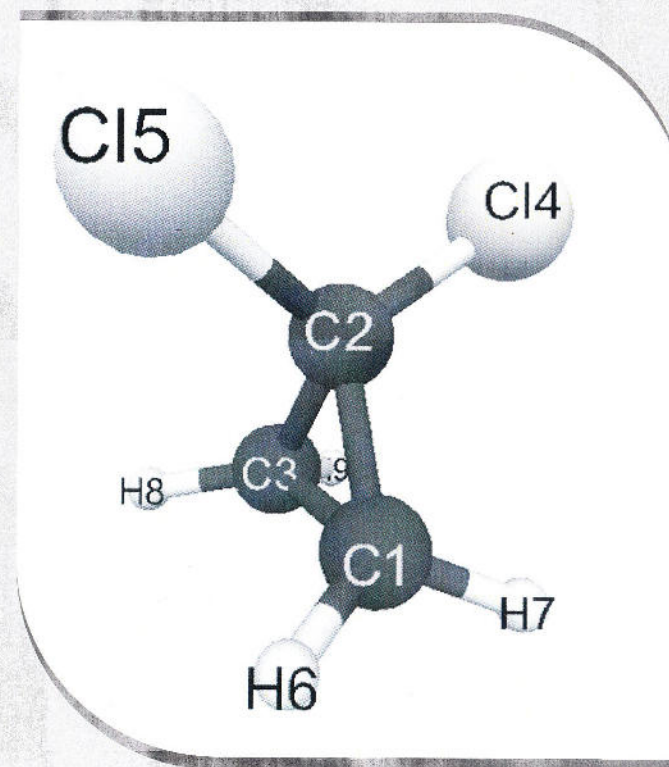


**СОПРЯЖЕННЫЕ ДИЕНЫ И СОЕДИНЕНИЯ
С МАЛЫМИ ЦИКЛАМИ.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ.
МЕТОД AM1**

СБОРНИК СТАТЕЙ



УДК 577.175

ББК 24.13

С64

Ответственный редактор
аспирант *Д.С. Андреев* (Себряковский филиал ФГБОУ ВПО «Волгоградский
государственный архитектурно-строительный университет»)

Рецензенты:

доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой
общей и прикладной химии *В.Т. Фомичев* (ФГБОУ ВПО «Волгоградский
государственный архитектурно-строительный университет»);

кандидат физико-математических наук,
доцент *Р.Г. Федун* (ФГАОУ ВПО «Волгоградский государственный университет»)

Сопряженные диены и соединения с малыми циклами. Квантово-химический расчет. Метод AM1 [Текст] : сб. ст. / под ред. асп. Д. С. Андреева ; Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. проф. образования «Волгогр. гос. архит.-строит. ун-т», Себряк. фил., г. Михайловка, Каф. мат. и естеств.-науч. дисциплин. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2014. – 142 с.

ISBN 978-5-9669-1295-6

В сборнике статей представлены результаты квантово-химических расчетов методом AM1 сопряженных диенов и соединений с малыми циклами – классических 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.

Сборник статей предназначен для бакалавров, магистров, научных работников, соискателей, аспирантов, занимающихся химией полимеров.

УДК 577.175

ББК 24.13

ISBN 978-5-9669-1295-6



© Авторы статей, 2014
© ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный
архитектурно-строительный университет».
Себряковский филиал, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

1. <i>Агафонов С.Г., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 6-метил-6-этилфульвена методом AM1	4
2. <i>Барышникова Е.А., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы циклогексадиена-1,3 методом AM1	11
3. <i>Семлюнов А.Е., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 6,6-диметилфульвена методом AM1	17
4. <i>Агафонов С.Г., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 1-метилбицикло[6,1,0]нонана методом AM1	24
5. <i>Агафонов С.Г., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 1-метил-9,9-дихлорбицикло[6,1,0]нонана методом AM1	31
6. <i>Барышникова Е.А., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы бицикло[3,1,0]гексана методом AM1	38
7. <i>Барышникова Е.А., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы n-пропилциклопропана методом AM1	44
8. <i>Барышникова Е.А., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 2-метилбицикло[4,1,0]гептана методом AM1	51
9. <i>Барышникова Е.А., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 8,8-дихлорбицикло[5,1,0]октана методом AM1	58
10. <i>Барышникова Е.А., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы фенилциклопропана методом AM1	65
11. <i>Карпилович Я.И., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы дициклопропила методом AM1	72
12. <i>Карпилович Я.И., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 1-метил-7,7-дихлорбицикло[4,1,0]гептана методом AM1	79
13. <i>Карпилович Я.И., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 13,13-дибромбицикло [10,1,0]тридекана методом AM1	85
14. <i>Реджепов Р.К., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 1-метилбицикло[10,1,1]тридекана методом AM1	93
15. <i>Реджепов Р.К., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 1,1-дихлор-2,2-диметилциклопропана методом AM1	100
16. <i>Реджепов Р.К., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 7,7-дихлорбицикло[4,1,0]гептана методом AM1	107
17. <i>Реджепов Р.К., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 7-хлор-7-бромбицикло[4,1,0]гептана методом AM1	113
18. <i>Свиридов В.Г., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 1,1-диметилциклопропана методом AM1	121
19. <i>Свиридов В.Г., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы бицикло[10,1,0]тридекана методом AM1	127
20. <i>Свиридов В.Г., Васильев Д.В.</i> Квантово-химический расчет молекулы 1-метилбицикло [4,1,0]гептана методом AM1	134