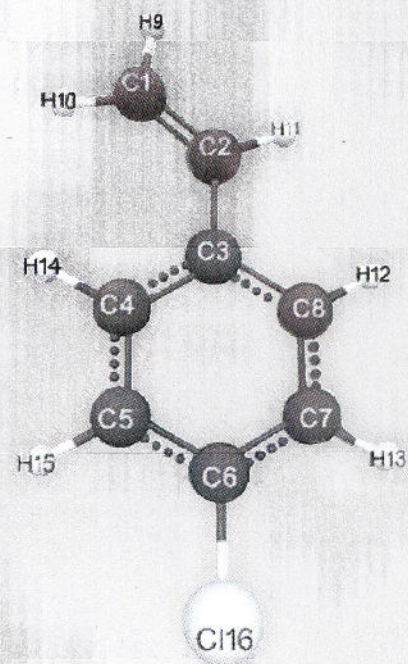


**СТИРОЛЫ.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ.
МЕТОД AM1**



УДК 577.175

ББК 24.13

С80

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. Федунев* (ФГАОУ ВПО «Волгоградский государственный университет»)

Стиролы. Квантово-химический расчет. Метод AM1 [Текст] : сб. ст.
С80 / 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. – 135 с.

ISBN 978-5-9669-1279-6

В сборнике статей представлены результаты квантово-химических расчетов
методом AM1 стирола и его производных – 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, интересующихся химией полимеров.

УДК 577.175

ББК 24.13

ISBN 978-5-9669-1279-6



© Авторы статей, 2014

© ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный
архитектурно-строительный университет».

Себряковский филиал, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

1. Свиридов В.Г., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы о-метоксистирила методом AM1	4
2. Свиридов В.Г., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы м-метоксистирила методом AM1	10
3. Свиридов В.Г., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы а-этилстирола методом AM1	17
4. Свиридов В.Г., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы а-метилстирола методом AM1	23
5. Свиридов В.Г., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы а-метил-п-метоксистирила методом AM1	30
6. Свиридов В.Г., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы п-динизопропенилбензола методом AM1	36
7. Семюнов А.Е., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы п-бензилоксистирила методом AM1	43
8. Семюнов А.Е., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы а-метил-п-метилстирола методом AM1	50
9. Семюнов А.Е., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы о-изопропилстирола методом AM1	56
10. Семюнов А.Е., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы о-хлорстирола методом AM1	63
11. Карпилович Я.И., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы п-хлорстирола методом AM1	69
12. Карпилович Я.И., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы м-хлорстирола методом AM1	76
13. Карпилович Я.И., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы п-цианостирила методом AM1	82
14. Карпилович Я.И., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы о-оксистирила методом AM1	88
15. Карпилович Я.И., Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы п-нитростирила методом AM1	94
16. Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы 2-изопропил-5-метилстирола методом AM1	101
17. Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы 2-метил-5-изопропилстирола методом AM1	107
18. Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы 2,5-диметоксистирила методом AM1	114
19. Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы 3,4-диметоксистирила методом AM1	121
20. Васильев Д.В. Квантово-химический расчет молекулы 2-метил-4-метокси-5-изопропилстирола методом AM1	127