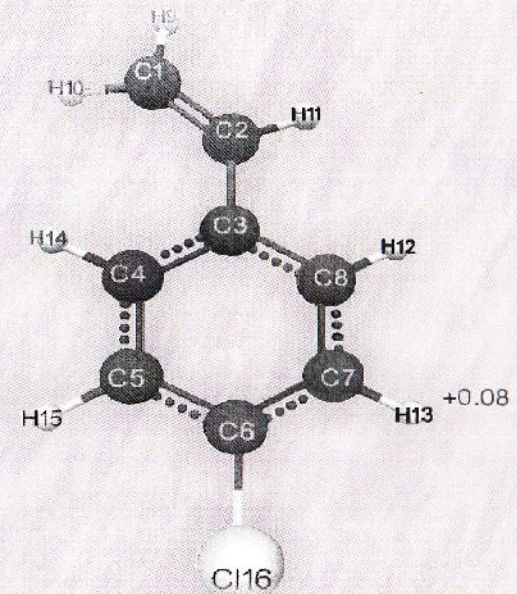


КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СТИРОЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ МЕТОДОМ MNDO



Главный редактор
доктор химических наук, профессор,
академик Международной академии «Контенант»,
зам. директора по НИР ГОУ ВПО «ВолГАСУ» *В. А. Бабкин*

Рецензенты:
доктор технических наук, профессор,
заведующий кафедрой общей и прикладной химии
В. Т. Фомичев (ГОУ ВПО «ВолГАСУ»);
кандидат физико-математических наук, доц. *Р. Г. Федун*
(ФГАОУ ВПО «ВолГУ»)

Квантово-химический расчет стирола и его производных методом MNDO [Текст] : сб. ст. / под ред. проф. В. А. Бабкина ; Себряк. фил. Волгогр. гос. архит.-строит. ун-та, г. Михайловка, Каф. мат. и естеств.-науч. дисциплин. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2014. – 233 с.

ISBN 978-5-9669-1269-7

В сборнике статей представлены результаты квантово-химических расчетов методом MNDO 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.

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

УДК 577.175
ББК 24.13

ISBN 978-5-9669-1269-7



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

СОДЕРЖАНИЕ

1. <i>В.А. Бабкин, Е.А. Кологривко.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 2-метил-5-изопропилстирола методом MNDO.	5
2. <i>В.А. Бабкин, Е.А. Кологривко.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 2,4-диметилстирола методом MNDO.	10
3. <i>В.А. Бабкин, Е.А. Кологривко.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы о-изопропилстирола методом MNDO.	15
4. <i>В.А. Бабкин, Е.А. Кологривко.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы о-метилстирола методом MNDO.	20
5. <i>В.А. Бабкин, Е.А. Кологривко.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-трет-бутилстирола методом MNDO.	25
6. <i>В.А. Бабкин, Е.А. Кологривко.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-изопропилстирола методом MNDO.	30
7. <i>В.А. Бабкин, Е.А. Кологривко.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-этилстирола методом MNDO.	35
8. <i>В.А. Бабкин, Е.А. Кологривко.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-метилстирола методом MNDO.	40
9. <i>В.А. Бабкин, Е.А. Кологривко.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы стирола (винилбензола) методом MNDO.	45
10. <i>В.А. Бабкин, К.С. Медведева.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 2,5-дихлорстирола методом MNDO.	50
11. <i>В.А. Бабкин, К.С. Медведева.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 3,4-дихлорстирола методом MNDO.	55
12. <i>В.А. Бабкин, К.С. Медведева.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы м-хлорстирола методом MNDO.	60
13. <i>В.А. Бабкин, К.С. Медведева.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы о-хлорстирола методом MNDO.	65
14. <i>В.А. Бабкин, К.С. Медведева.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-хлорстирола методом MNDO.	70
15. <i>В.А. Бабкин, К.С. Медведева.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-фторстирола методом MNDO.	75
16. <i>В.А. Бабкин, К.С. Медведева.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 2,6-диметил-4-трет-бутилстирола методом MNDO.	80
17. <i>В.А. Бабкин, К.С. Медведева.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы винилметилена методом MNDO.	85
18. <i>В.А. Бабкин, К.С. Медведева.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 2-изопропил-5-метилстирола методом MNDO.	90
19. <i>В.А. Бабкин, Д.Е. Забазнов.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы о-метоксистирирола методом MNDO.	95
20. <i>В.А. Бабкин, Д.Е. Забазнов.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-метоксистирирола методом MNDO.	100
21. <i>В.А. Бабкин, Д.Е. Забазнов.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-цианостирирола методом MNDO.	105
22. <i>В.А. Бабкин, М.Ю. Шкуратова.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-оксистирирола методом MNDO.	110
23. <i>В.А. Бабкин, М.Ю. Шкуратова.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы о-оксистирирола методом MNDO.	115
24. <i>В.А. Бабкин, М.Ю. Шкуратова.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы м-оксистирирола методом MNDO.	120
25. <i>В.А. Бабкин, Ю.В. Горшенин.</i> Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы м-метоксистирирола методом MNDO.	125

26. В.А. Бабкин, И.А. Короткова. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 2,6-диметокси- α -метилстирола методом MNDO.....	129
27. В.А. Бабкин, И.Ю. Великодный. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-бензилоксистирола методом MNDO.....	135
28. В.А. Бабкин, И.Ю. Великодный. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-ацетоксистирол методом MNDO.....	140
29. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев, В.Ю. Дмитриев. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы цис- α,β -диметилстирола методом MNDO.....	145
30. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев, В.Ю. Дмитриев. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы транс- α,β -диметилстирола методом MNDO.....	150
31. В.А. Бабкин, Н.С. Чернова, Д.С. Андреев. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы транс- β -н-пропилстирола методом MNDO.....	155
32. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы цис-п-метокси- β -метилстирола методом MNDO.....	160
33. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы цис- β -н-пропилстирола методом MNDO.....	165
34. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы цис-п-этокси- β -метилстирола методом MNDO.....	170
35. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы транс-п-этокси- β -метилстирола методом MNDO.....	175
36. В.А. Бабкин, А.В. Боков. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-дизопропенилбензола методом MNDO.....	181
37. В.А. Бабкин, А.В. Боков. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы α -метил-п-метоксистирирола методом MNDO.....	186
38. В.А. Бабкин, А.В. Боков, А.А. Денисов. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы α -метил-п-метилстирола методом MNDO.....	191
39. В.А. Бабкин, Е.А. Секачев, А.А. Денисов. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 2,4,5-триизопропил- α -метилстирола методом MNDO.....	196
40. В.А. Бабкин, Е.А. Секачев, А.А. Денисов. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 1,1-дефенилэтилена методом MNDO.....	202
41. В.А. Бабкин, Е.А. Секачев, А.А. Денисов. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы цис- β -метилстирола методом MNDO.....	207
42. В.А. Бабкин, В.С. Передунов, А.А. Денисов. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы 3,4-диметоксистирирола методом MNDO.....	212
43. В.А. Бабкин, В.С. Передунов, И.И. Бахолдин. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы п-диметиламиностирирола методом MNDO.....	217
44. В.А. Бабкин, В.С. Передунов, И.И. Бахолдин. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы м-нитростирирола методом MNDO.....	222
45. В.А. Бабкин, В.С. Передунов, И.И. Бахолдин. Теоретическая оценка кислотной силы и квантово-химическое моделирование молекулы α -этилстирола методом MNDO.....	227