

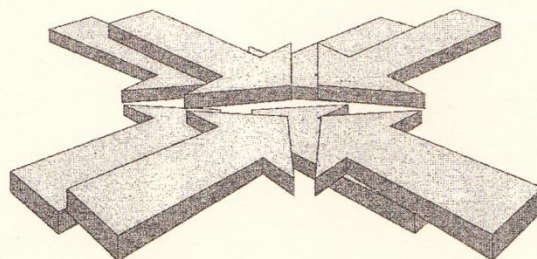
245
Б12

Федеральное агентство по образованию
Волгоградский государственный
архитектурно-строительный университет
Волгоградский клуб докторов наук

**НАНОНАУКА
И НАНОТЕХНОЛОГИИ**
с позиций физики, химии,
материаловедения и медицины
Часть 2

В.А. Бабкин, Р.Г. Федун

**КОМПЬЮТЕРНЫЕ
НАНОТЕХНОЛОГИИ
ПРИКЛАДНОЙ КВАНТОВОЙ
ХИМИИ**



Волгоград 2008

Федеральное агентство по образованию
Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет

НАНОНАУКА И НАНОТЕХНОЛОГИИ
С ПОЗИЦИЙ ФИЗИКИ, ХИМИИ,
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ И МЕДИЦИНЫ

Часть 2

В.А. Бабкин, Р.Г. Федун

КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАНОТЕХНОЛОГИИ
ПРИКЛАДНОЙ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

9598

Волгоград 2008

УДК 620.3:544.18
ББК 24.5
Б 12

Рецензенты: доктор химических наук, профессор В.Т.Фомичев (Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет); академик РАН, доктор химических наук, профессор А.И. Газинов (Институт химических проблем экологии, г. Волгоград)

Бабкин В.А.
Б 12 Компьютерные нанотехнологии прикладной квантовой химии : [монография] / В.А. Бабкин, Р.Г. Федун ; Волгогр. гос.archit.-строит. ун-т. — Волгоград : ВолгГАСУ, 2007. 136 с. (Нанонаука и нанотехнологии с позиций физики, химии, материаловедения и медицины : ч. 2).
ISBN 978-5-98276-252-8

Монография является составной частью издания, в рамках которого публикуются материалы теоретических и прикладных исследований волгоградских ученых в области нанонауки и нанотехнологий.

Приведены результаты научных исследований в области химии полимеров и окислителей различных топлив на электронном уровне, на основе которых разработаны новые компьютерные нанотехнологии.

Для научных работников, соискателей, аспирантов и докторантов.

ББК 24.5
УДК 620.3:544.18

ISBN 978-5-98276-252-8



© Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет», 2008

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	4
1. Компьютерная нанотехнология поиска новых более эффективных окислителей различных топлив	5
Введение	5
1.1. Квантово-химические методы расчета	5
1.2. Квантово-химический расчет фторсодержащих окислителей различных топлив	13
1.3. Корреляционные соотношения параметров горения и квантово-химических расчетов фтор- и кислородсодержащих окислителей различных топлив	16
1.4. Теоретическое обоснование зависимости параметров горения от минимального отрицательного заряда на атоме фтора окислителей	44
1.5. Алгоритмы технологии компьютерного поиска новых более эффективных фтор- и кислородсодержащих окислителей различных топлив	48
Список литературы	50
2. Компьютерная нанотехнология поиска новых более эффективных катализаторов катионной полимеризации олефинов	54
Введение	54
2.1. Особенности катионной полимеризации олефинов	55
2.2. Катионная активность комплексных катализаторов полимеризации олефинов	64
2.3. Квантово-химические полумпирические методы расчетов комплексных катализаторов — инициаторов катионной полимеризации олефинов	71
2.3.1. Комплексы галогенидов металлов с сильными протонодонорами	78
2.3.1.1. Комплексы хлористого водорода с хлоридами алюминия	78
2.3.1.2. Комплексы фтористого водорода с фторидами бора	80
2.3.1.3. Комплексы хлористого водорода с хлоридами магния	81
2.3.2. Аквакомплексы галогенидов металлов	83
2.3.2.1. Аквакомплексы хлоридов алюминия	83
2.3.2.2. Аквакомплексы фторидов бора	92
2.3.2.3. Аквакомплексы хлоридов магния	94
2.3.3. Комплексы спиртов галогенидов металлов	99
2.4. Катионная полимеризация олефинов как согласованный процесс	102
2.4.1. Взаимосвязь кислотно-каталитических свойств комплексных кислот Льюиса и Бренстеда	106
2.4.2. Взаимосвязь кислотно-каталитических свойств двойных и комплексных солей	107
2.5. Алгоритм компьютерного поиска новых более эффективных катализаторов катионной полимеризации олефинов	111
Заключение	112
Список литературы	115
Приложение	123