

А. М. КИМ, С. А. КУТОЛИН

Теория КЛОП и компьютерное моделирование свойств органических соединений

НОВОСИБИРСК · 1992

А. М. КИМ, С. А. КУТОЛИН

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Новосибирск 1992

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	8
Глава I. Физические характеристики химической связи	8
I.1. Длины химических связей	8
I.2. Эмпирические зависимости для выполнения длины связи	11
I.3. Длины связей	11
I.4. Энергия химической связи	11
I.5. Методы определения и значения энергии химической связи	11
I.6. Структура и характеристики химической связи в органических соединениях	11
Глава II. Теория КЛОП в органической химии	11
2.1. Теория КЛОП и замкнутые фенолы	11
Глава III. Применение теории КЛОП в органической химии	11
Глава IV. Компьютерное моделирование и прогнозирование свойств органических соединений	11
4.1. Компьютерное моделирование ингибирующей активности алкил-, алкиламидных фенолов	11
4.1.1. Бинарно-химическая и математическая постановка задачи. Результаты анализа	11
4.1.2. Анализ влияния функциональных групп фенолов на кинетические параметры в реакциях окисления	11
4.2. Компьютерное моделирование ингибирующей активности алкил-, алкиламидных фенолов	11
Заключение	11
Библиографический список	11
Ответы и указания к решению задач	11
Приложения	11

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	8
Список сокращений	8
Список условных обозначений	8
Глава I. Квантово-химические методы расчета	8
I.1. Введение	8
I.2. Качественные методы	8
I.2.1. Вариационный принцип	8
I.2.2. Различные уравнения Хартри - Фока	8
I.2.3. Варианты метода Хартри - Фока	8
I.2.4. Метод конфигурационного взаимодействия (КВ)	8
I.2.5. Метод MO - LCAO	8
Глава 2. Полуэмпирические методы расчета молекул	8
2.1. Принципы построения полуэмпирических расчетов	8
2.2. Приближение кулоновского дифференциального переэкранивания	8
2.3. Простой метод Хамметта	8
2.4. Расширенный метод Хамметта (РХМ)	8
2.5. Метод С ДУ	8
2.6. Метод I ДУ	8
2.7. Метод M ДУ	8
Глава 3. Расчеты по методу молекулярных орбиталей Хамметта	8
3.1. Энергетические уровни молекулярных орбит	8
3.2. Нормы текстовых уравнений	8
3.3. Расчет коэффициентов	8
3.4. Электронная плотность	8
3.5. Порядок связей и свободная валентность	8
3.6. Парезирование	8
Глава 4. Полуэмпирические расчеты электронной структуры молекул. Программа "Визит"	8
4.1. Введение	8
4.2. Методы входной информации	8
4.3. Подготовка информации для ввода	8
4.4. Режим составления геометрии	8
4.5. Расчеты исходных данных	8
4.6. Режим отладки	8
Глава 5. Характеристики электронной структуры замкнутых фенолов и их применение в анализе "структура - свойства"	8