**Андреева, Надежда Анатольевна.**

**Исследование ион-молекулярных систем для сорбции парниковых газов методами молекулярного моделирования : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07 / Андреева Надежда Анатольевна; [Место защиты: Санкт-Петербургский государственный университет]. - Санкт-Петербург, 2018. - 307 с. : ил.; 14,5х20,5 см.**

**Оглавление диссертациикандидат наук Андреева Надежда Анатольевна**

**ВВЕДЕНИЕ**

**Глава 1. Литературный обзор**

**1.1 Проблема изменения климата, роль диоксида углерода**

**1.2 Современные способы поглощения углекислого газа**

**1.3 Сорбенты диоксида углерода на основе ионных жидкостей**

**1.4 Карбонизация минералов для связывания диоксида углерода**

**1.5 Фуллерен субстрат для сорбента диоксида углерода**

**Глава 2. Обзор использованных методов**

**2.1 Общие принципы квантовой механики и молекулярной динамики**

**2.2 Полуэмпирический метод расчета электронной структуры PM7**

**2.3 Полуэмпирический метод молекулярной динамики РМ7-MD**

**2.4 Метод Gaussian 4 (G4)**

**2.5 Методы теории функционала плотности**

**Глава 3. Аминирование и карбамидирование органических катионов как основные химические процессы при сорбции диоксида углерода: термодинамические потенциалы реакций и их микроскопическая интерпретация**

**3.1 Исследуемые органические катионы и общий вид моделируемых реакций**

**3.2 Термодинамические потенциалы в реакции аминирования органических катионов**

**3.3 Термодинамические потенциалы реакции присоединения второй аминогруппы к избранным органическим катионам**

**3.4. Корреляция термодинамических потенциалов и зарядов на атомах катионов**

**3.5 Средние и дальние инфракрасные колебательные спектры аминированных катионов**

**3.6 Термодинамические потенциалы реакции карбамидирования**

**3.7 Энтропийный фактор реакции карбамидирования**

**3.8 Конформации полученных соединений**

**3.9 Средние и дальние инфракрасные колебательные спектры карбамидированных катионов**

**Глава 4. Фуллерен С60 как нелетучий субстрат для адсорбента диоксида углерода**

**4.1 Производные (С60-1ь)[5,6]фуллерена, схема хемосорбции СО2 и методы исследования**

**4.2 Конформации полученных соединений**

**4.3 Термодинамические потенциалы для реакций аминирования и карбамат образования производных (С60-1ь)[5,6]фуллерена**

**4.4 Электронные свойства модифицированного фуллерена**

**4.5 Свободная энергия переноса молекулы модифицированного фуллерена из воды в н-октанол**

**4.6 Распределение электронной плотности**

**Глава 5. Молекулярный дизайн поверхностно-активных ионных жидкостей для сорбции СО2**

**5.1 Баланс гидрофильности/гидрофобности**

**5.2 Взаимодействие с диоксидом углерода и водой**

**5.3 Экспериментальные методы исследования ПАИЖ**

**Глава 6. Сорбция диоксида углерода солями кальция и бария**

**Выводы**

**Список сокращений**

**Литература**