**Зачеславская, Рина Харитоновна.**

## Строение и протофильная активность простых виниловых эфиров - исходных продуктов для синтеза полиацеталей : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.03. - Ленинград, 1984. - 152 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Зачеславская, Рина Харитоновна

Введение

1. Краткое описание квантовохимических методов расчета электронной структуры молекул.

2. Структура простых виниловых эфиров.

2.1. Современное состояние вопроса о вращательной изомерии и геометрическом строении алкилви-ниловых эфиров .^.

2.2. Конформационный анализ молекулы метилвинилового эфира

2.3. Конформационный анализ дивиниловых эфиров.

3. Изучение и прогнозирование протофильной активности на основании расчетных данных.

Выбор индексов реакционной способности (ИРС)

3.1. Электронная структура виниловых эфиров и их реакционная способность

3.2. Расчетные (МЧПДП/2 ) энергии молекулярных орбиталей и потенциалы ионизации

3.3. Зависимость формы МО от строения радикала, связанного с винилокси- или аллилоксигруппой

4. Квантовохимический и термохимический анализ сопряжения в простых виниловых эфирах

4.1. Метод оценки.б?

4.2. Природа взаимодействия р -электронов атома кислорода JT -электронами двойнойязи. Тенденция изменения интенсивности p"JC-взаимодействия в зависимости от радикала,язанного с винилоксигруппой

4.3. Эффект сопряжения в неплоских молекулах

4.4. Экспериментальная проверка предложенной методики исследования энергии р -Jt сопряжения

5. Механизм электрофильного присоединения к простым виниловым эфирам.

5.1. Пространственная структура катионоидного интермедиата.

5.2. Электронная структура карбениевого иона.

Роль заместителей.

5.3. Протонированные формы виниловых эфиров

5.4. Особенности синтеза полиацеталей на основании результатов расчета катионоидного интермедиата.

Выводы