**Орлов, Юрий Димитриевич.**

## Расчет параметров уравнения Аррениуса реакций термической диссоциации многоатомных молекул в газовой фазе : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.17. - Калинин, 1984. - 195 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Орлов, Юрий Димитриевич

Введение

ГЛАВА. I. Обзор методов расчета параметров уравнения Арре-ниуса реакций термической диссоциации многоатомных молекул

1.1. Предэкспоненциальные факторы

1.1.1.Характеристики,определяющие величину предэкспо-нента.

1.1.2.Геометрическое строение переходного состояния

1.1.3.Характеристики внутренних вращений и колебаний в переходном состоянии

I.1.4.Обзор расчетов предэкспоненциальных факторов реакций радикального термораспада

1.2. Методы расчета энергий активации

1.2.1.Связь энергий активации с энергиями диссоциации химических связей и энтальпиями образования радикалов

1.2.2.Состояние численных данных по энергиям диссоциации связей и энтальпиям образования радикалов

1.2.3.Методы расчета энтальпий образования радикалов и энергий диссоциации химических связей

Выводы из 1-й главы.

ГЛАВА 2. Развитие метода расчета предэкспоненциальных факторов реакций термической диссоциации многоатомных молекул в газовой фазе.

2.1. Анализ влияния погрешностей характеристик переходного состояния на точность определения предэкспонента

2.2. Определение частот колебаний диссоциирующей молекулы

2.3. Оценка критической длины разрывающейся связи

2.4. Определение величин барьеров внутренних вращений в переходном состоянии

2.5. Расчеты предэкспоненциальных факторов газофазного термического распада индивидуальных соединений

2.5.1.Этан и гексафторэтан

2.5.2.Метан, метанол,аммиак

2.5.3 .Пропилен.

2.5.4.Пропан, н-бутан,изобутан и неопентан

2.6. Температурные зависимости предэкспоненциальных факторов

Выводы из 2-й главы.

ГЛАВА 3. Развитие аддитивно-группового метода расчета энергий диссоциации химических связей через энтальпии образования радикалов

3.1. Принципы построения аддитивно-групповой схемы расчета энергий диссоциации химических связей

3.2. Первое приближение схемы расчета энтальпий образования радикалов.

3.2.1.Алкильные радикалы и их производные,содержащие атомы О, N и S.

3.2.2.Радикалы с электроотрицательными заместителями

3.2.3.Радикалы с несопряженными циклами

3.2.4.Бирадикалы

3.2.5.Расчеты энергий диссоциации связей

3.3. Второе приближение схемы расчета энтальпий образования радикалов.IQ

3.4. Расчет энтальпий образования радикалов по методу инкрементов замещения.

Выводы из 3-й главы.

ГЛАВА 4. Компактная схема расчета энергий диссоциации химичеоких связей и энтальпий образования радикалов 110 4.1. Учет влияния свободной валентности на величины групповых вкладов.

4.2. Расчеты энергий диссоциации связей по компактной схеме. ИЗ

4.2.1.Изучение закономерностей изменения энергий диссоциации связей.

4.2.2.Оценки энергий диссоциации связей в макромолекулах

4.3. Взаимосвязь феноменологических схем расчета энергий диссоциации связей и энтальпий образования радикалов

Выводы из 4-й главы.