**Сизов, Евгений Александрович.**

## Роль систем межмолекулярных взаимодействий в формировании некоторых физических свойств органических соединений : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.03. - Ярославль, 1999. - 131 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Сизов, Евгений Александрович

Содержание

стр.

СПИСОК ПРИНЯТЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Соотнесение молекулярной структуры и свойств органических соединений. Метод С^РЯ

1.2 Молекулярная ассоциация и свойства растворов органических соединений

1.3 Модель парных обратимых межмолекулярных взаимодействий молекул в органических средах

ГЛАВА 2 МЕТОДЫ И ОБЪЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1 Методы исследования

Метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР)

Прецизионная термомеханика

Протонный магнитный резонанс

Пикнометрия

Дилатометрия

Расчет коэффициента молекулярной упаковки

2.2 Объекты исследования и применяемые вещества

ГЛАВА 3 РОЛЬ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ФОРМИРОВАНИИ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИИ (по результатам анализа базы данных свойств

органических соединений)

3.1 База данных как инструмент для установления зависимости: системы межмолекулярных взаимодействий-

физические свойства органических соединений

3.2 Оценка межмолекулярных взаимодействий по инкрементам энтальпий испарения органических соединений

3.3 Слабые (дисперсионные) межмолекулярные взаимодействия как фактор, формирующий физические свойства углеводородов различного строения

3.4 Сильные межмолекулярные взаимодействия функциональных групп как фактор, формирующий физические свойства органических соединений

3.5 Роль формы молекулы в формировании физических свойств органических соединений

ГЛАВА 4 АССОЦИАТИВНЫЕ ПРОЦЕССЫ И СТРУКТУРЫ В НЕКОТОРЫХ СЛОЖНЫХ ЭФИР АХ И УГЛЕВОДОРОДАХ (по результатам экспериментальных исследований)

4.1 Ассоциативные структуры бутиратов по данным спектроскопии ПМР

4.2 Температурная эволюция и топология ассоциативных структур бутиратов и их бинарных растворов

4.3 Ассоциативные структуры н-гептана, циклогептана и их бинарных растворов

ВЫВОДЫ

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

СПИСОК ПРИНЯТЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ QSPR - Quantitative Structure-Property Relationship - количественная

зависимость структура - свойство; ММВ - межмолекулярные взаимодействия; ИАР - идеальный ассоциированный раствор; ААР - атермический ассоциированный раствор; ИК-спектроскопия - инфракрасная спектроскопия; ЯМР - ядерный магнитный резонанс; ЭПР - электронный парамагнитный резонанс; ТГБК - триглицерид бутановой кислоты; МБ - метилбутират; БД - база данных.