**Нестеренко, Александр Михайлович.**

## Электронное строение и реакционная способность производных 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинов : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.03. - Киев, 1984. - 172 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Нестеренко, Александр Михайлович

Введение

Глава 1. Электронное строение и реакционная способность 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинов и их производных ( Литературный обзор )

1.1 Теоретическая интерпретация реакционной способности долгоживущих свободных радикалов

1.2 Электронное строение 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинов и их производных.

1.3 Экспериментальные данные о реакционной способности 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинов и их производных

Глава 2. Квантовохимическое изучение электронного и пространственного строения 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинов и их производных.

2.1 Электронное строение и физико-химические свойства 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинильных радикалов

2.2 Особенности электронного и пространственного строения ионов 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинилов

2.3 Электронное и пространственное строение лейковердазилов.

2.4 Реакционная способность и электронное строение ион-радикалов 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинов

Глава 3. Результаты квантовохимического изучения физико-химических свойств тетрагидро-тетрааза-3-фосфорина и его радикала.

3.1 Строение и свойства 1,2,3,4-тетрагидро-тетрааза-3-фосфорина.

3.2 Электронное и пространственное строение 1,2,3,4-тет-рагидро-симм-тетрааза-З-фосфорин-1-ильного радикала

3.3 Квантовохимичеекая интерпретация особенностей реакционной способности тетрагидро-симм-тетрааза-3-фосфорина и его радикала.

Глава 4. Теоретическая интерпретация реакционной способности тетрагидро-симм-тетразинов и их производных

4.1 Кинетическая стабильность вердазильных радикалов и особенности протекания их элементарных реакций

4.2 Квантовохимический расчет тепловых эффектов ряда реакций производных 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинов

•4.3 Изучение влияния природы заместителей на протекание элементарных реакций производных 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразинов

4.4 0 роли циклических переходных состояний при интерпретации реакционной способности вердазильных радикалов

Глава 5. Экспериментальное исследование особенностей некоторых характерных реакций 1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетразини-лов.

5.1 Синтез и физико-химические свойства пентафенилвердазиль-ного радикала.

5.2 Кинетическое изучение реакций отрыва атома водорода

2,3,3,4,6-пентафенил-1,2,3,4-тетрагидро-симм-тетрази-нильным радикалом.

5.3 Кинетическое изучение реакции пентафенилвердазила с перекисью бензоила

5.4 Идентификация и свойства катион-радикала пентафениллейко-вердазила.

Выводы