**Поролло, Алексей Александрович.**
Компьютерное моделирование термического распада нитросоединений : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Йошкар-Ола, 1999. - 135 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Поролло, Алексей Александрович

ВВЕДЕНИЕ

I. ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ДИЗАЙНА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ (обзор литературы)

1.1. Формально-математические способы описания молекулярных структур

1.1.1. Компьютерное представление химических соединений

1.1.2. Канонизация представления молекулярных структур

1.1.3. Особенности циклических систем

1.1.4. Построение трехмерных моделей молекул

1.2. Представление химических реакций

1.2.1. Эмпирический подход

1.2.2. Формально-логический подход

1.3. Критерии отбора реакций в программах компьютерного молекулярного дизайна

1.4. Способы представления генерируемых механизмов реакций

II. РАЗВИТИЕ МЕТОДОЛОГИИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

II. 1. Рекомбинационные реакционные сети как подход к моделированию механизмов химических реакций 37 II .1.1. Методология генерации моделей превращения химической системы

II. 1.2. Выделение законченных реакционных сетей

II. 1.3. Визуализация результатов моделирования 44 11.2. Программный комплекс САБВ и решение задач компьютерного молекулярного дизайна на его основе

11.2.1. Кодирование и канонизация представления химических структур

11.2.2. Алгоритм поиска циклических систем

11.2.3. Принципы построения базы знаний о химических реакциях

III. МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ТЕРМИЧЕСКОГО РАСПАДА

НИТРОСОЕДИНЕНИЙ

III. 1. Общая характеристика процессов термораспада

111.2. Правила генерации гемолитических реакций

111.3. Исследование термораспада нитросоединений различных химических классов 66 III. 3.1. Нитроалканы 66 III. 3.2. Алкилнитраты

111.3.3. Алициклические нитрамины

111.3.4. Азетидин и его моно-, ди- и тринитропроизводные