**Бондарев, Александр Александрович.**

## Масс- спектрометрические, калориметрические и квантово-химические методы в исследованиях строения, свойств и термической стабильности арендиазоний трифлатов, тозилатов и тетрафторборатов : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.03 / Бондарев Александр Александрович; [Место защиты: ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»]. - Барнаул, 2021. - 234 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Бондарев Александр Александрович

Общая характеристика работы

Глава 1. Литературный обзор

1.1 Строение диазониевых катионов и солей

1.2 Масс-спектрометрические исследования ДС

1.3 Экспериментальные исследования стабильности ДС

1.4 Квантово-химические исследования строения диазониевых катионов и диазониевых солей

Глава 2. Исследование строения и свойств ДС

2.1 Квантово-химические исследование строения и реакционной способности диазоний-катионов и их солей

2.1.1 Диазоний-катионы

2.1.1.1 Пространственное строение, частоты поглощения диазониевой группы и индексы Виберга связей

2.1.1.2 Квантовохимическое исследование электронного строения и свойств ДК при сканировании дистанции C-N

2.1.1.3 Изучение электронного строения диазониевых катионов методом трассировки молекулярных орбиталей (МТМО)

2.1.2 Квантово-химическое исследование взаимодействия диазониевых катионов с анионами

2.1.2.1 Строение диазониевых солей

2.1.2.2 Квантовохимическое исследование зависимости электронного строения и

свойств ДС при сканировании дистанции C1-N1

2

2.1.2.3 Сканирование ППЭ при изменении длины связи N -X

2

2.1.2.4 Сканирование ППЭ при изменении длины связи С -И

2.2 Масс-спектрометрическое исследование диазониевых солей

2.2.1 Масс спектры растворов диазониевых солей при ионизации электроспреем

2.2.2 Фрагментация диазониевых катионов. Оценка прочности диазониевых катионов в газовой фазе

2.2.3 Фрагментация кластерных частиц

2.2.4 Квантово-химическое исследование возможных интермедиатов при полимеризации в газовой фазе

2.2.5 Квантово-химическое исследование строения кластерных частиц ДС. Предлагаемый

механизм стабилизации при взаимодействии с противоионами

2.3 Исследование стабильности ДС калориметрическими методами

2.3.1 Исследование стабильности методом ТГА/ДСК

2.3.2 Исследование кинетики разложения ДС методом изотермической потоковой калориметрии. Анализ Аррениуса. Кинетика разложения при нормальных условиях

2.3.3 Исследование продуктов термического разложения ДС

2.3.4 Квантовохимическое исследование энергетики и предлагаемые механизмы термического разложения ДС, роль орто-протонов в процессах деструкции ДС

Глава 3. Экспериментальная часть

3.1 Получение диазониевых солей

3.2 Квантово-химические методы расчета в газовой фазе и растворе

3.3 Метод трассировки молекулярных орбиталей

3.4 Калориметрические методы

3.5 Масс-спектрометрические методы

Выводы

Список сокращений и условных обозначений

Список литературы

Приложение А

Приложение Б

Приложение В

Приложение Г

Приложение Д