**Карташинская, Елена Сергеевна.**

## Теоретическое моделирование пленкообразования неионогенных ПАВ на межфазной поверхности вода/воздух : квантово-химический подход : диссертация ... доктора химических наук : 02.00.04 / Карташинская Елена Сергеевна; [Место защиты: Твер. гос. ун-т]. - Донецк, 2018. - 257 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Карташинская, Елена Сергеевна

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ 2D-КЛАСТЕРИЗАЦИИ НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ НА МЕЖФАЗНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ВОДА/ВОЗДУХ (литературный обзор)

1.1. Квантово-механическое моделирование

1.2. Молекулярная механика

1.3. Мезошкальные подходы

ГЛАВА

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ РАСЧЕТОВ

2.1. Экспериментальное и теоретическое обоснование модели расчета термодинамических и структурных параметров кластеризации ПАВ

2.2. Основные положения модели расчета термодинамических параметров

кластеризации ПАВ

ГЛАВА

АНАЛИЗ ПОРОГОВ САМОПРОИЗВОЛЬНОЙ КЛАСТЕРИЗАЦИИ НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ

3.1. Монозамещенные алканы

3.2. Дизамещенные алканы

3.3. Причины существования порога самопроизвольной кластеризации

замещенных алканов

ВЫВОДЫ

ГЛАВА

КВАНТОВАНИЕ УГЛА НАКЛОНА ДИФИЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ МОНОСЛОЕ ОТНОСИТЕЛЬНО МЕЖФАЗНОЙ

ПОВЕРХНОСТИ ВОДА/ВОЗДУХ

ВЫВОДЫ

ГЛАВА

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДЛИНЫ ЦЕПИ НА МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ КЛАСТЕРИЗАЦИИ НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ

5.1. Геометрические параметры элементарных ячеек 2D-пленок а-замещенных карбоновых кислот

5.2. Термодинамические параметры образования бесконечных Ш и 2D-кластеров а-замещенных карбоновых кислот

5.3. Температурная зависимость термодинамических и структурных

параметров кластеризации ПАВ

ВЫВОДЫ

ГЛАВА

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ НА МЕЖФАЗНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ВОДА/ПАР АЛКАНОВ

6.1. Возможность внедрения алканов в монослои алифатических спиртов

6.2. Модель описания термодинамических параметров формирования 2D-монослоев алифатических спиртов на межфазной поверхности вода/пар алканов

6.3. Мономеры

6.4. Димеры

6.5. Тримеры и тетрамеры

6.6. Большие и бесконечные кластеры

6.7. Внедрение алканов в монослои неионогенных ПАВ на межфазной

границе вода/пар алканов

6.8. Внедрение алканов в монослои алкилнитрилов на межфазной

поверхности вода/пар алканов

ВЫВОДЫ

ГЛАВА

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТЕРМОДИНАМИКИ КЛАСТЕРИЗАЦИИ АЛКАНОВ НА МЕЖФАЗНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ВОДА/ПАР АЛКАНОВ В ПРИСУТСТВИИ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ

7.1. Особенности учета молекул парообразных алканов в используемой квантово-химической модели

7.2. Мономеры и димеры

7.3. Тримеры, тетрамеры и гексамеры

7.4. Большие и бесконечные кластеры

7.4.1. 2D-пленки 1 с одиночным распределением спиртов среди алканов

7.4.2. 2D-пленки 2 с доменным распределением спиртов среди алканов

7.5. Условия конкурирующей кластеризации алканов из газовой фазы

на поверхности воды в присутствии неионогенных ПАВ

ВЫВОДЫ

ОБЩИЕ ВЫВОДЫ

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ