**Шестакова, Розалия Габдулахатовна.**

## Взаимосвязь "структура-свойство" жидкокристаллических азотсодержащих гетероциклических соединений : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.17. - Уфа, 2006. - 145 с.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Шестакова, Розалия Габдулахатовна

СПИСОК УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОЙ

ХИМИИ (ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ)

1.1 Структура молекулы и мезоморфизм

1.1.1. Жидкокристаллическое состояние вещества

1.1.2. Классификация жидких кристаллов

1.1.3. Структура молекул, образующих жидкие кристаллы

1.2. Гетероциклические жидкие кристаллы

1.2.1. Мезоморфные свойства азотсодержащих гетероциклических трехкольчатых соединений (АГС)

1.2.2. Пространственное строение мезоморфных АГС

1.3. Компьютерное моделирование органических соединений 34 1.3.1. Компьютерное моделированиеЖК 35 1.3.1.1. Эмпирические методы моделирования ЖК 3 5 1.3.1.2 Квантово-химические полуэмпирические и неэмпирические методы моделирования ЖК 40 1.3.1.3. Методы компьютерного анализа ЖК

ГЛАВА 2. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АГС (ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ)

2.1. Исследование зависимости "структура -жидкокристаллическая активность " в ряду АГС

2.2. Квантово-химическое исследование АГС

2.2.1. Выбор метода расчета мезоморфных АГС

2.2.2. Квантово-химический анализ геометрического строения и энергетических параметров незамещенных АГС

2.2.3. Квантово-химический анализ геометрического строения и энергетических параметров бутил- и бутоксизамещенных мезоморфных АГС

2.2.4. Конформационный анализ АГС

2.2.5. Исследование межмолекулярных взаимодействий в мезоморфных АГС

2.3. Исследование взаимосвязи " структура - свойство" в ряду жидкокристаллических АГС

2.3.1. Влияние природы центрального азотсодержащего кольца на Тпл

2.3.2. Изучение влияния полярности молекул на свойства ЖК

2.3.3. Компьютерный анализ структурирования мезоморфных АГС

ГЛАВА 3. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЖК

3.1. Квантово-химические программы для расчетов АГС

3.2. Методика квантово-химических расчетов изолированных молекул АГС

3.2.1. Расчет равновесной геометрии и решение колебательной задачи

3.2.2.Конформационный анализ молекул

3.2.2.1. Сканирование ППЭ

3.2.2.2. Нахождение переходного состояния

3.2.3. Термохимический расчет изменения энтальпии, энтропии и свободной энергии при конформационных переходах

3.2.4. Расчет порядков связей, величины дипольного момента и его направления

3.3. Методика квантово-химических расчетов димеров

3.3.1. Расчет равновесной геометрии димеров

3.3.2. Определение энергии взаимодействия димеров при различных конфигурациях

3.3.3. Разложение полной энергии по методу МОРОКУМА

3.3.4. Определение величины дисперсионной энергии

3.3.5. Компьютерный расчет структурирования ЖК

3.4. Анализ взаимосвязи " структура - жидкокристаллическая активность" с помощью системы SARD 124 ВЫВОДЫ 127 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ