**Карасев, Юрий Зельманович.**

## Определение систем полуэмпирических параметров для прогнозирования спектральных кривых ИК поглощения некоторых рядов циклопарафинов : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Москва, 1984. - 230 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Карасев, Юрий Зельманович

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР. РАСЧЕТНЫЕ МЕТОДЫ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И ИХ РОЛЬ В УСТАНОВЛЕНИИ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ. Ю

§ I. Основные принщпы построения автоматизированных систем установления структуры молекул по их спектрам. Ю

§ 2. Расчет частот в колебательных спектрах.

§ 3. Расчет интенсивностей в ИК-спектрах

§ 4. Исследование возможностей использования расчетных методов колебательной спектроскопии для идентификации органических"соединении

§ 5. Расчеты частот и интенсивностей в колебательных спектрах циклогексана, циклопентана и их производных.

ГЛАВА П. МЕТОДИКА РАСЧЕТА СИЛОВЫХ ПОСТОЯННЫХ, ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ЦИКЛОПАРАФИНОВ.

§ I. Программные средства.

§ 2. Методика подготовки данных для расчета колебательных спектров циклопарафинов

§ 3. Техника построения расчетных кривых Ж поглощения

§ 4. Метод определения силовых постоянных циклогексана и его производных.

§ 5. Метод определения электрооптических параметров циклогексана и его производных.

§ 6. Метод определения силовых и электрооптических параметров циклопентана и его производных

- s

ГЛАВА Ш. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ УГЛЕВОДОРОДОВ, СОДЕРЖАЩИХ 5- И 6

ЧЛЕННЫЕ ЦИКЛЫ БЕЗ АЛКИЛЬНЫХ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ.

§ I. Циклогексан и его дейтеропроизводные.

§ 2. Циклопентан и его дейтеропроизводные.

§ 3. Сочлененные бшдаклические углеводороды: цикло-гексшгциклогексан, циклопентшщиклопентан, цик-лопентилциклогексан, фенилциклопентан, фенил-циклогексан.

§ 4. Цис- и транс-декалины, спироС5,5]ундекан.

§ 5. Адамантан и бицикло[2,2,2]октан.

ГЛАВА 1У. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ АЛКИЛЗАМЕЩЕННЫХ ЦИКЛОГЕКСАНА И ЦИК

ЛОПЕНТАНА.

§ I. Метилпроизводные циклогексана.

§ 2. Метилпроизводные циклопентана и этилциклопентан

§ 3. О возможности использования расчетных спектральных кривых ИК поглощения для установления строения алкилциклопарафинов.

ВЫВОДЫ.