**Кирлан, Владислав Владимирович.**

## Прогноз и молекулярный дизайн гетероорганических соединений с комплексом заданных свойств : Разработка методов, программная и практическая реализация : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.17. - Уфа, 2003. - 343 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Кирлан, Владислав Владимирович

1. Обзор литературы.

1.1. Предпосылки и возможности молекулярного дизайна и прогноза химических соединений с заданными свойствами.

1.2. Способы описания структуры соединений.

1.3. Характеристика методов выявления закономерностей цБрг и цБаг.

1.4. Подходы и компьютерные системы выявления связи между строением и свойствами химических соединений.

1.5. Характеристики классов исследуемых соединений.

1.5.1. Характеристика производных бензимидазола и их антигельминтная активность.

1.5.2. Анализ зависимостей между строением и гербицидным действием гетероциклических производных амидо-и иминосодержащих гетероциклических соединений.

1.5.3. Характеристика биологической активности производных оксикарбоновых кислот.