**Исаева, Галина Александровна.**

## Термодинамические свойства органических соединений и их связь с биологической активностью : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Калинин, 1984. - 159 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Исаева, Галина Александровна

ВВВДЕНИЕ.

ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.

1.1 Термодинамика органических соединений в газообразной и конденсированной фазах.

1.1.1 Корреляционные соотношения для расчета термодинамики фазовых переходов.

1.1.2 Структурно-аддитивные систематики.

1.2 Моделирование молекулярных взаимодействий двухатомных фрагментов.

1.3 Связь физико-химических свойств молекул с биологической активностью.

ГЛАВА 2. АНАЛИЗ СТРУКТУРНО-АЖИЖВНЫХ СИСТШАТИК.

2.1 Выбор модели: молекула - система взаимодействующих атомов.

2.2 Квантовохимический расчет взаимодействия двух ненасыщенных молекул.

2.3 Межмолекулярные потенциалы. Расчет энтальпий сублимации циклических соединений.

2.4 Энергия образования молекул в газовой и конденсированной фазах

2.4.1 Энергия изолированных молекул.

2.4.2 Энергия образования твердых веществ.

ГЛАВА 3. АДДИТИВНЫЕ СХЕМЫ РАСЧЕТА ЭНЕРШИЧЕСКЙХ СВОЙСТВ

ВЕЩЕСТВ В РАЗЛИЧНЫХ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЯХ.

3.1 Стандартные энтальпии образования метилзамещенных бензола в газообразной и конденсированной фазах . 71 3.1.1 Статистический анализ результатов расчета стандартных энтальпий образования метилзамещен-ных бензола в состоянии идеального газа

3.1.2 Статистический анализ результатов расчета стандартных энтальпий образования метилзамещенных бензола в жидкой фазе.

3.1.3 Статистический анализ результатов расчета стандартных энтальпий образования метилзамещенных бензола в твердом состоянии.

3.2 Стандартные энтальпии образования метилзамещенных пиридина в конденсированной фазе.

3.3 Стандартные энтальпии образования нитрозамещенных бензола и полиазинов в конденсированной фазе

3.4 Стандартные энтальпии образования метилзамещенных полиазинов в конденсированной фазе.

3.5 Энтальпии сублимации полиаценов.

ГЛАВА 4. МОДЕЛЬНЫЕ РАСЧЕТЫ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ ПО ТШЛОДШШШЕСКИМ ДАННЫМ

4.1 Биологическая активность анестетиков.

4.1.1 Теоретическая модель взаимодействия анестетиков с биомембранами.

4.1.2 Экспериментальные данные по анестезирующему действию ряда веществ и их квантовохимический анализ

4.1.3 Термодинамические свойства органических соединений и их связь с биологической активностью

4.2 Структурные и термодинамические характеристики лшшдных бислоев.

ВЫВОДЫ.