**Папулов, Роман Юрьевич.**
Методы перечисления изомеров замещения молекулярных полиэдров и расчета их физико-химических свойств : диссертация ... кандидата физико-математических наук в форме науч. докл. : 02.00.04. - Тверь, 1998. - 34 с. : ил.; 21х14 см.

## Заключение диссертациипо теме «Физическая химия», Папулов, Роман Юрьевич

Выводы

1. Дан вывод изомеров замещения полиэдров, имеющих v = 6, 8 мест возможного замещения'. Определены цикловые индексы групп и производящие функции числа изомеров. Это же самое сделано для ряда полиэдров с иным числом мест замещения.

2. Показано, что замещенные полиэдров с v = 6 разделяются на 11 семейств h6, h5x, h4x2, h4xy, ЬЗхЗ, h3x2y, h3xyz, h2x2y2, h2x2yz, h2xyzu, hxyzuv, содержащих соответственно 1, 1, 2, 2, 2, 3 , 4, 5, 6, 9 изомеров для октаэдра; по 1, 1, 3, 3, 3, 6, 10, 11, 16, 30, 60 изомеров для шестиугольника (бензола), тригональной призмы (призмана) и тригональной антипризмы и др.; 1, 2, 4, 5, 4, 8, 12, 12, 17,27, 45 изомеров для тетрагональной бипирамиды и т.д.

3. Замещенные полиэдров с v = 8 разделяются на 22 семейства h8, h7x, h6x2, h6xy, h5x3, h5x2y, h5xyz, h4x4, h4x3y, h4x2y2, h4x2yz, h4xyzu, h3x3y2; h3x3yz, h3x3y2z, h3x2yzu, h3xyzuv, h2x2y2z2, h2x2y2zu, h2x2yzuv, h2xyzuvw, hxyzuvwq, содержащих соответственно 1, 1, 3, 3, 3, 6, 10, 6, 10, 16, 22, 38, 17, 30, 42, 76, 140, 68, 114, 216, 420, 840 изомеров для куба (кубана), 1, 1, 4, 4, 5, 12, 21, 8, 19, 36, 54, 105, 38, 70, 105, 210, 420, 171, 318, 630, 1260, 2520 изомеров для квадратной антипризмы и т.п.

4. Найдены распределения изомеров по семействам среди X-, XY-,. замещенных, по числу мест замещения и др. Выполнено перечисление изомеров при учете их хиральности и симметрии.

5. Проведена систематика изомеров замещения этана и его аналогов (с учетом конформационных особенностей), бензола, циклопропана, призмана и др.

6. Построены схемы расчета свойств X-, XY-,. замещенных этана (и его гетероаналогов), бензола, циклопропана и др. Выяснены взаимосвязи между различными схемами.

7. Разобраны упрощения, возникающие в расчетных схемах , при действии допущения о среднем арифметическом для невалентных взаимодействий. Установлено число необходимых для расчета параметров в различных приближениях.

8. Выполнены численные расчеты энтальпий образования галоген- и метилзамещенных этана, бензола и др., согласующиеся с экспериментом. Сделаны предсказания. Получены новые данные.

9. Выявлены отдельные закономерности в изменениях свойств в рядах исследуемых соединений