

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
Часть I. Ассоциация и некоторые физические свойства жидких органических соединений	13
Глава 1. Роль межмолекулярных взаимодействий в формировании физических свойств жидких органических соединений	13
1.1. База данных физических свойств органических соединений как инструмент для установления корреляционной зависимости: молекулярная структура – система ММВ – физические свойства	13
1.2. Слабые межмолекулярные взаимодействия как фактор, формирующий физические свойства углеводородов	16
1.3. Сильные межмолекулярные взаимодействия функциональных групп как фактор, формирующий физические свойства органических соединений	25
1.4. Вклад формы молекул в формирование физических свойств органических соединений	33
Глава 2. Температурная эволюция ассоциативных структур жидких органических соединений	48
2.1. Модель ассоциации жидких органических соединений при парных обратимых взаимодействиях однотипных атомных групп молекул	48
2.2. Особенности ассоциативного состояния жидких органических соединений при температурах кипения	58
2.2.1. Предельная диссоциация ассоциативных структур при температурах кипения	58
2.2.2. Компактизация формы молекул при температурах кипения	71
2.3. Особенности ассоциативного состояния жидких стеклующихся органических соединений при температурах плавления	81
2.4. Двухстадийность плавления застеклованных органических соединений	99
Часть II. Ассоциация и кинетика радикальной полимеризации эфиров акрилового ряда	105
Глава 3. Ассоциативные структуры эфиров акрилового ряда	105
3.1. Температурная эволюция и топология ассоциативных структур (мет)акрилатов	105

3.2. Роль центров слабых межмолекулярных взаимодействий в формировании ассоциативных структур н-алкил(мет)акрилатов	130
3.3. Тип ассоциативных структур ди(мет)акрилатов как свойствообразующий фактор	155
3.4. Трансформация ассоциативных структур в процессе радикальной полимеризации н-алкилметакрилатов (модельные системы)	164
3.5. Межмолекулярные взаимодействия протонсодержащих фрагментов молекул н-алкил(мет)акрилатов	177
Глава 4. Роль ассоциации в кинетике радикальной полимеризации эфиров акрилового ряда	178
4.1. Влияние ассоциативных структур (мет)акрилатов на реакцию радикального инициирования	178
4.2. Влияние регулярных ассоциатов (мет)акрилатов на реакцию роста полимерной цепи	186
4.2.1. Кинетические аномалии полимеризации некоторых олигоэфиракрилатов. Гипотеза о существовании кинетически активных ассоциатов	186
4.2.2. Кинетические проявления регулярных ассоциатов на начальных стадиях радикальной полимеризации высших алкил(мет)акрилатов	192
4.2.3. Компьютерное моделирование строения и температурной стабильности ассоциатов высших алкил(мет)акрилатов	213
4.2.4. Кинетические аномалии глубоких стадий полимеризации высших н-алкил(мет)акрилатов как проявление кинетически активных ассоциатов	229
Приложение 1. Расчет инкрементов энтальпий испарения органических соединений	242
Приложение 2. Расчет энергий межмолекулярных взаимодействий органических соединений методом молекулярной механики	248
Литература	258