**Михалко, Виктор Кириллович.**

## Квантовохимическое исследование влияния молекулярного кислорода на электронные спектры органических молекул : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Москва, 1985. - 149 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Михалко, Виктор Кириллович

ВВЕДЕНИЕ.

1. ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА НА ЭЛЕКТРОННЫЕ

СПЕКТРЫ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ (обзор литературы)

1.1. Экспериментальные исследования.

1.2. Теоретическое рассмотрение

2. МЕТОДИКА РАСЧЕТА.

2.1. Полуэмпирические методы расчета электронных спектров .органических молекул.

2.2. Методика расчета электронных спектров триплет-триплетного поглощения систем с триплетным основным состоянием

2.3. Применимость полуэмпирических методов МО для расчета влияния межмолекулярного взаимодействия на электронные спектры

2.4. Устойчивость решений и сходимость итераций метода ССП в применении к межмолекулярному взаимодействию

2.5. Комплекс программ IN2)О SÄT для полу эмпирического расчета электронных спектров органических молекул.

3. РАСЧЕТЫ СПЕКТРА КОМПЛЕКСА ЭТИЛЕН-КИСЛОРОД.

3.1. Влияние параметризации на вычисленное положение возбужденных уровней молекул этилена и кислорода

3.2. Влияние геометрической конфигурации и межмолекулярного расстояния на характеристики электронного спектра бимолекулярного комплекса этилен-кислород.

4. РАСЧЕТЫ СПЕКТРА КОМПЛЕКСА БЕНЗОЛ-КИСЛОРОД.

5. РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ КИСЛОРОДА С М0Н03АМЕЩЕННЫМИ БЕНЗОЛАМИ.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ. вывода .П