**Спатарь, Федор Александрович.**
Электронное строение и свойства диоксиминов никеля, палладия и платины : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.01. - Кишинев, 1985. - 132 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Спатарь, Федор Александрович

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА I. СВОЙСТВА ДИОКСИМИНОВ МЕТАЛЛОВ. МЕТОД МО ЛКАО.

1.1. Комплексы о4-диоксимоб с никелем, палладием и платиной.

1.2. Метод МО ЛКАО.

1.2Л. Метод Хартри-Фока-Г^таана.

1.2.2. Метод Малликена-Вольфсберга-Гельмгольца.

1.2.3. Электронные спектры поглощения.

1.2.4. Метод МО и межмолекулярное взаимодействие.

ГЛАВА II. ЭЛЕКТРОНКЮЕ СТРОЕНИЕ оС-ДИОКСШОВ И ИХ

КОМПЛЕКСОВ С НИКЕЛЕМ,. ПАЛЛАДИЕМ И ПЛАТИШЙ.

2.1. Расчет электронной структуры методом МВГ.

2.2. Электронное строение и природа химической связи в диоксиминах.

ГЛАВА III. ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ.

3.1. Введение.

3.2. Изучение реакционной способности диоксиминов по отношению к кислороду, пероксидным частицам и воде.

3.3. Квантовохимическое изучение каталитической активности диоксиминов в уретанообразовании.

3.4. Межмолекулярное взаимодействие, способ упаковки в кристаллах и растворимость планарных диоксиминов.

ГЛАВА 1У. ФОТОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА.

4.1. Интерпретация электронных спектров поглощения планарных диоксиминов.

4.2. Фотохимическое поведение <ч-диоксимов и их пленарных комплексов.

ВЫВОДЫ.

ЛИТЕРАТУР А.

- 4