**Аникин, Николай Алексеевич.**

## Неэмпирические расчеты модельных каталитических металлокомплексных систем : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Москва, 1984. - 157 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Аникин, Николай Алексеевич

ВВЕДЕНИЕ.

I. ВВЕДЕНИЕ В НЕЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ К КОМПЛЕКСАМ ПЕРЕХОДНЫХ

МЕТАЛЛОВ. • . . II расчета,

1.1» Не эмпирические ме тоды Гмногоатомных молекул II 1.2« Не эмпирические расчеты комплексов переходных металлов.

П. РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ ДЛЯ НЕЭМПИРИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

2.1\* Структура, особенности и возможности программы КВАНТ-Ш-77(А)

2.1.1. Методические особенности программы

2.1.2. Вид базисных орбиталей, используемых в программе

2.1.3. Принцип молекулярной фрагментации и его реализация в программе.

2.1.4. Общая' структура программы.

2.1.5. Ввод информации

2.2. Вычисление молекулярных интегралов в базисе гибридизованных гауссовых орбиталей

2.2.Ш. Математическое описание орбиталей, используемых в программе.

2.2.2. Формулы для молекулярных интегралов

2.2.3. Вывод формул.

2.3. Генерация начального приближения.

2.4. Реализация псевдопотенциала в программе

Ш. РАСЧЕТЫ МОДЕЛЬНЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОКОМШГЕКСНЫХ

СИСТЕМ - ♦ . •

311« Взаимодействие атома Ш с насыщенными молекулами % и СН4 -------.

3.2« Диссоциативное присоединение.молекулы HgK . атому VdL . « . • . .• . . . . ♦

3.3. Карбонил, карйонилгидриды паджадияи.их пере^ . . группировка •

3.4. Карбеновне и алкильные комплексы Tl . ,. V. #. Сг 1X

ВЫВОДЫ . \*