**Герасимчук, Анатолий Иванович.**

## Влияние электронного и геометрического строения бета- дикетонатов металлов III-А подгруппы на их термические свойства : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.01. - Киев, 1984. - 197 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Герасимчук, Анатолий Иванович

ВВЕДЕНИЕ.5

ГЛАВА I. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.8

1.1. Общая характеристика -дикетонатов металлов. 8

1.2. Црирода химической связи в ^ -дикетонатах металлов .11

1.2.1. Спектрометрическое исследование ^ -дикетонатов металлов.11

1.2.2. Квантовохимические расчеты химической связи ь £ -дикетонатах металлов.14

1.3. Исследование структуры^ -дикетонатов металлов. 19

1.3.1. Дифракционные исследования -дикетонатов металлов .20

1.3.2. Колебательная спектроскопия^ -дикетонатов металлов.27

1.4. Дипольные моменты ^ -дикетонатов металлов . . 32

1.5. Термическая устойчивость ^ -дикетонатов металлов .35

1.5.1. Масс-спектрометрическое исследование^» -ди-кетонатов металлов .36

1.5.2. Термические исследования.£ -дикетонатов металлов .38

1.5.3. О взаимосвязи параметров термостабильности с электронным строением.44

1.6. Летучесть vjb -дикетонатов металлов и ее связь со строением.48

1.7. Обсуждение и выводы.50

ГЛАВА П. МЕТОДИКИ РАСЧЕТА И ЭКСПЕРИМЕНТА.56

ГЛАВАШ. ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕJS -ДИКЕТОНАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ Ш-А ПОДГРУППЫ .64

3.1. Расчет распределения электронной плотности в молекулах^ -дикетонатов Ш~А металлов .64

3.2. ИК-спектры и их связь с электронным строением

-дикетонатов Ш-А металлов. . 85

3.3. Энергия связи остовных электронов в^ -дикетонатных комплексах Ш-А металлов методом ЭСХА. . . 91-

ГЛАВА 4. ОСОБЕННОСТИ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ КОМПЛЕКСОВ И ДИНАМИЧЕСКАЯ НЕЖЕСТКОСТЬ ^ -ДИКЕ

ТОНАТОВ Ш-А МЕТАЛЛОВ .97

4.1. Равновесные значения длин связей и углов в молекулах дикетонатов. . 98

4.2. Потенциальные поверхности энергии центрального атома в координационном узле -дикетонатов . . 103

4.3. Динамическая нежесткость координационного узла

-дикетонатов Ш-А металлов .I08-II

4.4. Дипольные моменты^ -дикетонатов металлов Ш-А подгруппы в связи с динамической нежесткостью координационного узла.II2-II

4.5. ИК-спектры и геометрическое строение^ -дикетонатов Ш-А металлов .II5-II

4.6. Оценка возможности раскрытия хелатного цикла ^-дикетонатов.II8-I2I

ГЛАВА 5. СВЯЗЬ УСТОЙЧИВОСТИ КОМПЛЕКСОВ -ДИКЕТОНАТОВ Ш-А ПОДГРУППЫ С ИХ СТРОЕНИЕМ.122

5.1. Квантовохимический расчет энергетических характеристик мономолекулярного распада -дикетонатов. 122

5.2. Масс-спектрометрическое исследование устойчивости^ -дикетонатов металлов Ш-А подгруппы. . . . 126

5.2.1. Анализ путей фрагментации при ионизации методом электронного удара .129

5.2.2. Анализ путей фрагментации при химионизации

-дикетонатов . 133

5.2.3. Зависимость путей распада молекул^ -дикетонатов от их строения.134

5.3. Термическая стабильность комплексов^ -дикетонатов I-A металлов и ее связь с особенностями распределения электронной плотности в них . 139-

ГЛАВА б. ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО И ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ £ -ДИКЕТОНАТОВ МЕТАЛЛОВ Ш-А ПОДГРУППЫ

НА ИХ ЛЕТУЧЕСТЬ . I49-I6I

ГЛАВА 7. ПЕРСПЕКТИВЫ ПРОГНОЗИРОВАННОГО ПРИМЕНЕНИЯ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ В ХИМИИ^ -ДИКЕТОНАТОВ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ.162

ВЫВОДЫ . 168