**Лещев, Дмитрий Владимирович.**
Квантово-химический расчет магнитных характеристик комплексов переходных металлов : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Санкт-Петербург, 1999. - 127 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Лещев, Дмитрий Владимирович

Содержание

Введение

Глава 1. Обзор литературы

§1.1. ЭПР - средство анализа электронной структуры комплексов переходных металлов\_\_

§1.2. Теория кристаллического поля (ТКП)\_\_\_\_\_9

§13. Общая теория ЭПР\_\_\_\_\_\_12

§1А Модели ^-тензоров\_' '\_

§1.4.1. Теория возмущений\_\_15

§1.4.2. Модель Блини и О'Брайен\_\_17

§1.4.3. Электронный спиновый резонанс (ЭСР) для комплексов с $>\Г2\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_22

§1.5. Расчеты ^-тензоров методами квантовой химии \_

§1.6. Постановка задачи\_\_\_\_\_\_\_\_28

§1.7. Объекты исследований\_\_\_\_\_\_30

§1.8. Полуэмпирические методы расчета\_\_\_\_\_\_\_40

Глава 2. Алгоритм расчета g-meнзopa комплексов переходных металлов \_\_\_\_\_\_\_\_46

§2.1. Алгоритм расчета ^-тензора\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_46

§2.2. Реализация алгоритма для метода INDO\_\_\_\_49

§23. Методика расчета g-тензоров полуэмпирическими методами в миогоэлектронном приближении\_\_\_\_\_57

Глава 3. Результаты расчетов и их обсуждение\_63

§3.1. Комплексы рутения (III)\_\_\_\_\_63

§3.2.Ион Кройтц-Таубе\_\_\_\_\_\_\_\_\_67

§3.3. Низкоспиновые комплексы железа (III)\_\_73

§3.4. Шестикоординационный гидрат меди (II)\_\_\_\_\_\_81

Заключение\_\_84

§4.1. Анализ моделей и сравнение их с результатами

расчетов\_

§4.2. Результаты работы\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_88

Приложения\_

Литература\_