**Войт, Елена Ивановна.**

## Особенности электронного и геометрического строения фторидов циркония, ниобия и молибдена по данным неэмпирических квантово-химических исследований : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04 / Ин-т химии Дальневосточ. отд-ления РАН. - Владивосток, 1999. - 145 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Войт, Елена Ивановна

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.

1.1. Строение фторцирконатов.

1.1.1. Общие закономерности строения фтороцирконатных кристаллов.

1.1.2. Строение фторцирконатов в парах, растворах и расплавах.

1.1.3. Строение фторцирконатных стекол.

1.2. Строение пентафторидов молибдена и ниобия.

1.2.1. Строение пентафторидов Мо и №> в твердом состоянии.

1.2.2. Строение пентафторидов Мо и №> в жидкой и газовой фазах.

1.3. Квантово-химическое исследование соединений Zr(IV), ЫЬ(У), Мо(У).

ГЛАВА II. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ПРИРОДЫ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ.

2.1. Квантово-химические методы исследования электронного строения вещества.

2.2. Основные приближения, используемые в расчетах электронных состояний.

2.3. Неэмпирические методы квантовой химии. Орбитали Гауссовского типа

2.4. Приближение локальной плотности. Дискретно-вариационный Ха-метод

2.5. Интерпретация результатов квантово-химических расчетов.

2.6. Методы оптимизации. Метод Нелдера-Мида.

2.7. Визуализация геометрии кластеров и подготовка входных данных для квантово-химических комплексов. Программный комплекс Coord.

ГЛАВА III. ЭЛЕКТРОННОЕ И ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ,

СТАБИЛЬНОСТЬ И СВОЙСТВА ФТОРЦИРКОНАТОВ.

3.1. Квантово-химическое исследование модельных фторцирконатных кластеров.

3.1.1. Методические аспекты квантово-химических расчетов.

3.1.2. Электронные и геометрические характеристики кластеров [ZrFn](4"n') (п = 4-9) по данным ДВМ-Х« расчетов.

3.1.3. Электронные и геометрические характеристики модельных димеров [Zr2Fnf-n).

3.1.4. Электронные и геометрические характеристики модельных полимеров [Zr4F24] ".

3.1.5. Качественное сравнение жесткости связи Zr-F во фторцирконатных кластерах с различной координацией и степенью полимеризации.

3.1.6. Роль катионного окружения в строении фторцирконатов.

3.2. Теоретическое обоснование закономерностей строения фторцирконатов. Энергетический подход.

3.3. Ab initio исследование структуры и колебательных спектров систем

ZrFn](4"п).

3.4. Исследование некоторых закономерностей стеклообразования во фторцирконатных системах.

ГЛАВА IV. КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ПЕНТАФТОРИДОВ МОЛИБДЕНА И НИОБИЯ.

4.1. Методика расчета.

4.2. Исследование строения пентафторида молибдена.

4.3. Исследование строения пентафторида ниобия.